Agilent ChemStation

ChemStation リビジョン B.04.02 SP1 のアップグレード準備ガイド

Agilent Technologies

注意

© Agilent Technologies, Inc. 1994-2009, 2010

本マニュアルは米国著作権法および国際著作権法によって保護されており、Agilent Technologies, Inc. の書面による事前の許可なく、本書の一部または全部を複製することはいかなる形式や方法（電子媒体による保存や読み出し、外国語への翻訳なども含む）においても、禁止されています。

マニュアル番号

G2170-96234

エディション

4/2010

Printed in Germany

Agilent Technologies
Hewlett-Packard-Strasse 8
76337 Waldbronn

ソフトウェア リビジョン

このガイドは、Agilent ChemStation ソフトウェアのリビジョン B.04.02 SP1 以降のバージョンに対して有効です。

Microsoft は、Microsoft Corporation の米国の登録商標です。

保証

このマニュアルに含まれる内容は「現状のまま」提供されるもので、将来のエディションにおいて予告なく変更されることがあります。また、Agilent は、適用される法律によって最大限に許可される範囲において、このマニュアルおよびそれに含まれる情報に関して、商品性および特定の目的に対する適合性の暗黙の保証を含みそれに限定されないすべての保証を明示的か暗黙的かを問わず一切いたしません。Agilent は、このマニュアルまたはそれに含まれる情報の所有、使用、または実行に付随する過誤、または偶然的または間接的な損害に対する責任を一切負わないものとします。Agilent とお客様の間に書面による別の契約があり、このマニュアルの内容に対する保証条項がこの文書の条項と矛盾する場合は、別の契約の保証条項が適用されます。

技術ライセンス

このマニュアルで説明されているハードウェアおよびソフトウェアはライセンスに基づいて提供され、そのライセンスの条項に従って使用またはコピーできます。

安全に関する注意

注 意

注意は、危険を表します。これは、正しく実行しなかったり、指示を順守しないと、製品の損害または重要なデータの損失にいたるおそれがある操作手順や行為に対する注意を喚起します。指示された条件を十分に理解し、条件が満たされるまで、**注意**を無視して先に進んではなりません。

警 告

警告は、危険を表します。これは、正しく実行しなかったり、指示を順守しないと、人身への傷害または死亡にいたるおそれがある操作手順や行為に対する注意を喚起します。指示された条件を十分に理解し、条件が満たされるまで、警告を無視して先に進んではなりません。

研究目的のみ。

このガイドでは …

このガイドでは、Agilent ChemStation B.04.02 ソフトウェアのアップグレードと分析システムの設定ステップについて説明します。マニュアルは、ChemStation をアップグレードする前にリソースとして使用する必要があります。

1 Agilent ChemStation リビジョン B.04.02 の概要

この章では、以前のリビジョンと比較した Agilent ChemStation リビジョン B.04.02 での変更およびこのガイドの内容に関する情報の概要を説明します。

2 Agilent ChemStation リビジョン B.04.02 にアップグレードする前提条件

この章では、Agilent ChemStation ソフトウェアが正常に動作するための最小要件がリストされています。Agilent ChemStation の適切な動作を確保するために満たすべき要件についての詳細情報が記載されています。要件には、PC タイプと性能、ネットワークプロトコル、プリンタタイプ、GPIB/LAN カード、USB-GPIB インタフェース、オペレーティングシステムおよび分析機器のファームウェアリビジョンが含まれます。

3 Agilent ChemStation リビジョン B.04.02 へのアップグレード方法

この章では、Agilent ChemStation リビジョン B.04.02 へアップグレードする方法について説明します。アップグレード中のアドオンソリューションの取り扱いについても説明します。

4 初めて ChemStation リビジョン B.04.02 を起動する場合

この章では、グラフィックやデザインのように、旧リビジョンと比較して変更された機能の大部分をカバーしています。新しい機能は、アップグレードパッケージに付属している追加マニュアルで詳しく説明されています（たとえば、新しい積分パラメータについては、『ChemStation の概要』）。リビジョン A システムからのアップデートの他に、16 ビットファイルを 32 ビット ChemStation へアップロードするプロセスについても説明します。

5 コンプライアンス情報

この章では、『ソフトウェアアップグレードの適格性評価』についての概要と、OQ/PV 使用法の変更点について説明します。

6 カスタマイズされたソリューションへの影響

マクロなどのカスタマイズされたソリューションの使用法および書き方や、Unicode 形式で書き直すのに必要な操作についても記載しています。

7 再解析データのタイムスタンプおよびレポート メソッドにおけるアップグレードの影響

この章はリビジョン A.xx.xx. からのアップグレードにのみ関連します。

8 定量メソッドへのアップグレードの影響（リビジョン A.xx.xx からのアップグレードに関連した内容のみ）

この章には、リビジョン A.xx.xx ChemStation（G2070AA、G2170AA など）でさまざまなインテグレータを使用するメソッドでの違いと影響の概要がまとめられています。標準インテグレータ、拡張積分、拡張ベースラインオプションのある拡張積分。

9 アップグレードが LC メソッドへ与える影響

この章では、クラシックドライバを使ったときと RC.NET ドライバを使ったときの、取り込みパラメータの格納方法の違いを説明します。

10 ChemStation リビジョン B.04.0x を使ったときのスペクトル / 純度オプション（リビジョン A.xx.xx のアップグレード関連のみ）

この章では、ChemStation リビジョン A にある 2 つの使用可能なスペクトル / 純度のツールセットの違いの概要を説明します。ChemStation リビジョン B.0x.0x では、リビジョン A.04.02 で導入されたスペクトルツールが標準ツールセットになりました。以前のスペクトルツールは使用できなくなりました。

11 付録

付録では、異なるバージョンで生成されたクロマトグラム例が提供されます。

目次

1 Agilent ChemStation リビジョン B.04.02 の概要 7

このドキュメントについて 8
ChemStation リビジョン B.01.01 以降の新しい技術と変更された技術 9
使用可能なユーザーマニュアル 15

2 Agilent ChemStation リビジョン B.04.02 にアップグレードする前提条件 17

Agilent ChemStation PC ハードウェア詳細 19
オペレーティングシステムの要件 24
LC 機器のファームウェア要件 25
GC 機器ファームウェア要件 31
LC/MS 機器のファームウェア要件 34
CE 機器のファームウェア要件 35
通信コンポーネント 36

3 Agilent ChemStation リビジョン B.04.02 へのアップグレード方法 39

ChemStation Plus の場合： 41
機器固有のアップグレードの説明 48
アドオンソリューションを含む ChemStation システムのアップグレード手順 50
アドオンソリューションがインストールされた状態でのアップグレード方法 53
機器の設定 64

4 初めて ChemStation リビジョン B.04.02 を起動する場合 65

B.04.02 で導入されたスタートアップの変更 67
B.04.01 で導入されたスタートアップの変更 78
B.03.0x と B.02.0x で導入されたスタートアップの変更 85

5 コンプライアンス情報 109

リビジョン B.04.0x のアップグレードについての一般コンプライアンス情報 110
アップグレードの検証 111

6 カスタマイズされたソリューションへの影響 113

マクロソリューションの新しいデータ構造の影響 114
ChemStation A.xx.xx のアップグレードがマクロソリューションに与える影響 118
LC ChemStation で RC.NET ドライバの使用がマクロソリューションに与える影響 121

7 再解析データのタイムスタンプおよびレポート メソッドにおけるアップグレードの影響 123

8 定量メソッドへのアップグレードの影響（リビジョン A.xx.xx からのアップグレードに関連した内容のみ） 125

一般的側面 127
標準インテグレータからのアップグレード 132
拡張インテグレータからのアップグレード 137
拡張ベースラインを用いたインテグレータからのアップグレード 154

9 アップグレードが LC メソッドへ与える影響 159

10 ChemStation リビジョン B.04.0x を使ったときのスペクトル / 純度オプション（リビジョン A.xx.xx のアップグレード関連のみ） 163

スペクトル / 純度ツールセットの概要 164
「新しい」スペクトル / 純度ツールセットへのアップグレード 167
UV ライブラリおよびそれらの結果 175

11 付録 177

ChemStation レポート 178

1 Agilent ChemStation リビジョン B.04.02 の概要

このドキュメントについて 8

ChemStation リビジョン B.01.01 以降の新しい技術と変更された技術 9

使用可能なユーザーマニュアル 15

この章では、以前のリビジョンと比較した Agilent ChemStation リビジョン B.04.02 での変更およびこのガイドの内容に関する情報の概要を説明します。

Agilent Technologies は、LC、GC、A/D および LC/MS の 新しいバージョンのマルチテクニック ChemStation についてお知らせできることをうれしく思います。マルチテクニック ChemStation ファミリは、幅広いシステムで使用でき、機器コントロールおよびデータの取得と管理ができます。設計上はモジュール式なので、ラボで必要な大きさまで、システムによって拡張や拡大ができます。システムによって、柔軟性のある新しいデータ管理という特長とともに、新しい設計とツリーベースのナビゲーションが提供されます。

このドキュメントについて

注記 『アップグレード準備ガイド』は、既存の ChemStation をアップグレードするユーザーにのみ適用可能です。この文書では、以前のリビジョンの ChemStation との比較での**変更**にのみ言及しています。

注記 ChemStationB.04.02 は、Windows XP と Windows Vista でサポートされています。Windows XP は SP3 のみサポートされています。Windows Vista は SP2 のみサポートされています。ChemStation B.04.02 にアップグレードするには、必要に応じて ChemStation のアップグレード前にオペレーティングシステムを更新する必要があります。『「最低限の PC 要件」19 ページ 図』を参照し、PC の最低要件も確認してください。

既存の Agilent ChemStation システムの更新のドキュメントとして使用できます。

A.09.03 以降から Agilent ChemStation リビジョン B.04.02 へ

B.0x.0x から Agilent ChemStation リビジョン B.04.02 にアップグレード

ドキュメントには、更新の技術部分と、特定の新しい機能と変更のシステムに与える影響の概要がまとめられています。リビジョン A からリビジョン B へのアップグレードに関連する章にだけ、ヘッダに情報が追加されます。

新しい機能については、ユーザーマニュアルとオンラインヘルプに詳細が記載されています。

マニュアル『ChemStation のインストール』および『ChemStation の概要』は、それに従って更新されており、新しいソフトウェアリビジョンとともに出荷されます。

ChemStation リビジョン B.01.01 以降の新しい技術と変更された技術

ChemStation リビジョン B.04.02 および B.04.02 SP1 で導入された変更点と新機能：

- [**イージーシーケンス**]: シーケンスのプランニング、生成、キューイングのための使いやすい新ユーザーインタフェースです。
- [**イージーシーケンス**] キュー (B.04.02 SP1) の優れた新機能

- LC のみ：
  - Agilent 1120 Compact LC (B.04.02 DSP1)、新しい SFC Fusion A5 (B.04.02 SP1)、新しい Agilent 1290 Infinity LC System のサポート。

    Agilent 1290 Infinity LC システムは、以下のハードウェアモジュールで構成されます。
    - Agilent G4220A 1290 バイナリポンプ
    - Agilent G4226A 1290 高性能オートサンプラ
    - Agilent G1316C 1290 カラムコンパートメント
    - Agilent G4212A 1290 DAD
    - Agilent G4227A Infinity Flexible Cube (B.04.02 SP1)
  - [**メソッド & ランコントロール**] ビューの LC 機器コントロール用の新しいユーザーインタフェースは、以下の機能を備えています。
    - デスクトップスペースを有効に利用するため、機器コントロールパネルのサイズを自由に変更する機能.
    - 重要な情報だけを表示するための表示 / 非表示機能
    - 同一種類の複数のデバイス（例えば、2 つのポンプ）のグラフィック表示
    - すべてのバルブのグラフィック表示
    - 各モジュールのメソッドパラメータとすべての重要な機能への直接アクセス

- 個々のモジュールのステータス表示とそれに伴う機器全体のステータス表示
- 特定の機能について重要情報を表示するツールチップ
- 現在の分析またはシーケンスラインのサンプル情報の表形式表示
- OpenLAB ECM のデータ解析のパラメータと設定への直接アクセス（G2189BA ChemStation OpenLAB オプションを使用した場合のみ）

- GC のみ
  - Agilent 6890 および 6850 GCs における 7693A オートサンプラ サポート
  - Agilent 7820A GC (B.04.02 DSP2)
  - G7300AA Easy SamplePrep (B.04.02 SP1)
  - 新しい 78xx（バージョン 3.01）および 68xx（バージョン 6.01）ソフトウェアドライバ (B.04.02 SP1) で優れたメソッド変換
  - 新しい 78xx（バージョン 3.01）および 68xx（バージョン 6.01）ソフトウェアドライバ (B.04.02 SP1) で、メソッドの編集からカラムやバルブ、ガスタイプ、シリンジサイズを変更する機能
  - 新しい 68xx（バージョン 6.01）ソフトウェアドライバ (B.04.02 SP1) でバーコードのサポート

- LC/MSD のみ：
  - G6120B、G6130B、G6150B を含む新しい Agilent 6100B シリーズシングル四重極 LC/MS システムのサポート
  - Agilent Jet Stream （G6150B のみ互換性あり）のサポート

- CE のみ
  - 新しい Agilent 7100 CE システム (B.04.02 DSP1) のサポート

ChemStation リビジョン B.04.01 SP1 で導入された変更点と新機能：

- Agilent 7890A GC での 7693A オートサンプラシステム G4513A (ALS)、G4514A（トレイ）、G4515A (BCR) のサポート。
- LC および LC/MSD ChemStation メソッド開発システムおよびスカウティングウィザードのサポート。

ChemStation リビジョン B.04.01 に導入された変更と新機能：

- 追加情報を保存するためのサンプルと化合物のカスタムフィールド
- ［データ解析］ビューの重ね書き機能強化
- 既存のシーケンスコンテナへのデータ取り込み（［ユニークなフォルダ作成］オン）
- データファイルへのマニュアル積分イベントの保存
- データ解析を扱うシーケンスとメソッドのユーザビリティ強化
- GC のみ：
  - eMethods
- Agilent 7890A GC のみ：
  - サンプリングダイアグラム
  - **［メソッド変換］**ダイアログボックスに、メソッドとハードウェアの違いを詳述したレポートを表示
  - カラム補償
  - デジタル自動ゼロ
  - パラメータ編集画面に表示されるグラフィックプロット
  - シングルランについて、ソフトウェアによる分析中の GC パラメータの編集
  - GC パラメータの編集には、GC がレディ状態を判断する方法を指定する、新しいメソッド編集ページ
  - ランタイムイベント編集機能の強化
  - リミット外の値の強調表示

- LC のみ：
  - Agilent 1200 G1314D VWD と G1314E VWD SL Plus のサポート
  - Agilent 1200 G1367D 高性能オートサンプラ SL Plus のサポート

ChemStation リビジョン B.03.01 に導入された変更と新機能：

- ChemStation ソフトウェアがデュアルコアプロセッサ互換になりました。
- ChemStation では、ユーザーがワークフローに合ったデータ保存を選択できるように、2 つのデータ保存モードが導入されました。
  - モード 1:[**ユニークなフォルダ作成**] オン - サンプルデータの整合性のため
  - モード 2:[**ユニークなフォルダ作成**] オフでは、ChemStation の旧リビジョンと同様に、1 つのディレクトリにすべてのデータを保存します
- レポートレイアウトのカスタマイゼーションに性能パラメータを使用できます
- 日本薬局方（JP）に基づいて性能パラメータを計算できます
- [ナビゲーションテーブル] で取り込みパラメータを簡単にレビューできます
- オンラインヘルプの目次のカスタマイゼーション
- 結果データ用の拡張 XML インタフェース
- GC のみ：
  - 新しい Agilent 7890A GC システムの導入および完全対応
  - Agilent 6890 から Agilent 7890A GC へのメソッド転送
  - Agilent 7890A GC での GC オーバーラップ注入をサポート
  - ユーザーインタフェースが、Agilent 7890A GC システムでバックフラッシングするための第 2 圧力源に接続されたカラムのネガティブ流量設定値の入力をサポート。ネガティブ流量は、流れの方向の変化を示します。
  - [**リテンションタイムロッキング**]（RTL）を GC ChemStation ソフトウェアに統合

  - 新しい Agilent Lab Advisor ソフトウェアのサポート
- LC のみ：
  - G1315D Agilent 1200 ダイオードアレイ検出器のサポート
  - G1365D Agilent 1200 多波長検出器のサポート
  - G1329B Agilent 1200 オートサンプラ SL のサポート
- LC/MS のみ：
  - 新しい Agilent 6100 シングル四重極シリーズ LC/MS G6110A、G6120A、G6130A、G6140A LC/MS の導入および完全対応
  - 中国語と日本語にローカライズした LC/MS ソフトウェア

ChemStation リビジョン B.02.01 に導入された変更と新機能：

- 新しい、改善された ChemStation ユーザーインターフェイスデザイン
- 新しい、ツリーベースとテーブルベースのナビゲーションによって、さまざまな ChemStation ビュー内ですばやく柔軟にデータを処理できます
- データ、メソッド、およびシーケンスの自由な保存場所
- 改善されたデータレビューと、データ解析ナビゲーションテーブルを使用した再解析機能
- 新しいパッケージングコンセプトによって、シーケンスの整合性とシングルランのサンプルデータが保証されます
- 追加のシグナルオプションによって、メソッド固有のシグナルオプションを割り当ててデータレビューを改善させることができます
- マニュアル積分イベントは、新しく取得したデータファイルとともに、データ解析メソッドに保存できます
- オンラインヘルプには ChemStation チュートリアルが統合され、自分のメソッドとデータで作業しながら、ソフトウェアを学習できます
- 高解像度モニタと利用可能な画面の有効利用
- G1312B Agilent 1200 バイナリポンプ SL（デガッサ含む）のサポート
- G1367C Agilent 1200 高性能オートサンプラ SL のサポート
- G1314B Agilent 1200 可変波長型検出器 SL のサポート

- G1316B Agilent 1200 サーモスタットのサポートカラムコンパートメント SL
- Agilent 1200 LC シリーズのサポート
- GPC アドオンソフトウェア G2182BA のサポート
- 新しい Agilent LC 診断ツールへの直接ソフトウェアリンク

ChemStation リビジョン B.01.03 に導入された変更と新機能：

- Agilent Ion Trap MSD を検出器として使用する LC システムを対象とした、新しい G4240A Agilent 1100 チップキューブ用のソフトウェアサポート
- 新しい G1315C Agilent 1100 ダイオードアレイ検出器 (DAD) および新しい G1365C Agilent 1100 多波長検出器 (MWD) のソフトウェアサポート
- GPIB 通信ベースの LC および CE システム (HP 1090、HP 1046、HP1049、CE、CE/MS) 用の USB-GPIB インタフェース (PN 82357A) のサポート
- マルチモードソースのサポート
- マルチメソッド FIA をサポート
- データ交換用の NETCDF プロトコルをサポート

ChemStation Plus の場合：

- ChemStore との統合を改善 (ChemStore がインストールされている場合)
- すべての ChemStation Plus のアプリケーションは、一般的なプログラムグループで使用可能

使用可能なユーザーマニュアル

Agilent ChemStation 製品マニュアルは、リファレンス情報を含むハンドブックおよびタスク指向のトピックについてのオンラインマニュアルから構成されています。また、ハードコピーマニュアルは、必要な Adobe Acrobat リーダーとともに、DVD-ROM 内の manuals ディレクトリにもあります。

追加の分析機器（ケーブル、分析機器への接続など）のインストールの詳細については、お使いのシステムの『ChemStation のインストール』マニュアルを参照してください。

1 Agilent ChemStation リビジョン B.04.02 の概要

使用可能なユーザーマニュアル

2 Agilent ChemStation リビジョン B.04.02 にアップグレードする前提条件

Agilent ChemStation PC ハードウェア詳細 19
最低限の PC 要件 19
HP 以外のコンピュータ 21
Agilent ChemStation 用のプリンタ 21
アドバンストパワーマネージメント（分析ハードウェアではサポートしません） 23
オペレーティングシステムの要件 24
LC 機器のファームウェア要件 25
1100/1200 LC 機器ファームウェア要件 25
1120 Compact LC ファームウェア要件 30
GC 機器ファームウェア要件 31
35900E A/D コンバータのファームウェア要件 33
LC/MS 機器のファームウェア要件 34
CE 機器のファームウェア要件 35
通信コンポーネント 36
LAN 通信の使用法 36
GPIB および USB-GPIB 通信の使用 36

この章では、Agilent ChemStation ソフトウェアが正常に動作するための最小要件がリストされています。Agilent ChemStation の適切な動作を確保するために満たすべき要件についての詳細情報が記載されています。要件には、PC タイプと性能、ネットワークプロト

コル、プリンタタイプ、GPIB/LAN カード、USB-GPIB インタフェース、オペレーティングシステムおよび分析機器のファームウェアリビジョンが含まれます。

Agilent ChemStation PC ハードウェア詳細

このセクションでは、Agilent ChemStation を問題なくインストールし動作させるために満たす必要のある、PC ハードウェアおよびオペレーティングシステムの要件を記載します。

Agilent ChemStation B.04.02 以降は、Intel Pentium IV 1.5 GHz 以上（Windows XP）または 3.4 GHz（Windows Vista）を備えたパーソナルコンピュータでサポートされます。GPIB インタフェースを使用する場合は、PCI スロットが 1 つ必要です。その代わりに、Agilent USB-GPIB インタフェースデバイス 82357A または 82357B を使用できます。GPIB および USB-GPIB のインタフェース要件の詳細は、『LC/CE インストールマニュアル』を参照してください。

LAN 接続を分析機器に使用している場合は、オペレーティングシステムでサポートされている LAN インタフェースが必要で、Microsoft TCP/IP プロトコルがインストールされている必要があります。すべての PC ハードウェアおよび周辺機器は、Microsoft のハードウェア互換性リスト（HCL）にリストされている必要があります。このリストは、ワールドワイドウェブ上の Microsoft のホームページ（http://www.microsoft.com）から入手できます。PC ハードウェアが HCL に収載されていない場合、システムが Agilent ChemStation ソフトウェアと正しく動作しないことがあります。

最低限の PC 要件

Agilent Technologies ChemStation ソフトウェア（バージョン B.04.02）の**最低限の**ハードウェア要件は以下の通りです。

- Intel Pentium IV プロセッサ（Windows XP の場合は 1.5 GHz、Windows Vista の場合は 3.4 GHz シングルコア）を搭載した PC
- 1,280 x 1,024 Super VGA 解像度、17 インチディスプレイ、16,000 色以上（推奨：19 インチ、解像度 1440 x 900）
- Windows XP の場合は 40 GB ハードディスク（600 MB の空き容量）、Windows Vista の場合は 160 GB ハードディスク
- DVD-ROM ドライブ

- Windows XP の場合:512 MB RAM (推奨:1 GB); Windows Vista の場合:1 GB RAM (推奨:2 GB)
- MS Windows 互換ポインティングデバイス
- LAN = Ethernet IEEE 802.3 規格 10/100 Base T
- ハブと LAN ボード間の LAN 配線は、RJ-45 コネクタ付きカテゴリー 4 以上の UTP
- 最長 100 m のケーブルをサポート
- オペレーティングシステム互換プリンタ:
  - 英語版システムの場合は、PCL 5c、5e、5.02、または 6 に対応したプリンタ
  - 日本語版システムの場合は、Canon LBP-430、450、470、1310、または 3410
  - 中国語版システムの場合は、PCL 6 に対応したプリンタ
- Microsoft Windows XP Professional (Service Pack 3) または Microsoft Windows Vista Business (Service Pack 1) のいずれかのオペレーティング環境
- LAN 通信を使用している場合は、TCP/IP プロトコル対応ソフトウェアがインストール済みであること
- GPIB 通信を使用している場合:適切な PC や Agilent IO ライブラリスイート 15.0 に応じて、82350 (A または B モデル) GPIB ボード、または 82357 (A または B モデル) USB-GPIB インタフェース。IO ライブラリスイートのインストール方法については、ChemStation DVD の Manuals¥Installation フォルダを参照してください。

すべての PC ハードウェアおよび周辺機器は、インターネット上の Microsoft ホームページ (http://www.microsoft.com) から入手できる Microsoft ハードウェア互換性リスト (HCL) に記載されている必要があります。PC ハードウェアが HCL に記載されていない場合は、システム上で Agilent ChemStation ソフトウェアが正しく動作しないことがあります。

HP 以外のコンピュータ

Agilent ChemStation は、Intel PC プラットフォームおよび Microsoft Windows オペレーティングシステムのためのプログラミング基準を順守したアクセサリおよび周辺機器を装備した広範囲の互換性のある PC で正常に動作するように設計されています。

しかし、Agilent は Agilent ChemStation ソフトウェアを主に HewlettPackard/Compaq の機器でテストしました。このマニュアルに示された設定情報はすべて、Hewlett-Packard/Compaq Kayak、Vectra および EVO のコンピュータに適用されるもので、他のベンダーの PC には最適化されていない場合があります。たとえば、GPIB インタフェースの標準設定は、HP 以外のコンピュータのメモリ設定と競合する恐れがあります。追加付属品インタフェースボードが、リソース（I/O ポート、遮断設定、DMA チャンネル）と関連するハードウェアの矛盾の原因になることがあります。

Hewlett-Packard 以外のコンピュータに対して、メーカーが提供するセットアップユーティリティプログラムを使用してコンピュータを設定して、一緒に提供される付属文書および付属品を確認して、PC のセットアップでの、特に GPIB インタフェースのコンフィグレーションに関するリソースのコンフリクトを排除します。

Agilent ChemStation 用のプリンタ

Agilent ChemStation は、オペレーティングシステムと互換性のあるプリンタと連携するよう設計されています。PC のローカルポート（なるべくならパラレルポート）またはネットワークポートにプリンタを取り付けます。シリアルポートプリンタはオペレーティングシステムに対応していますが、速度性能が制限される可能性があります。ネットワークプリンタは、Microsoft オペレーティングシステムでサポートされているネットワークプロトコルを実行するネットワークサーバーによって共有される必要があります。エスケープコード言語（PCL など）またはページ記述言語（PostScript® など）を変換できるプリンタをお勧めします。ホストベースのプリンタ（GDI または PPA プリンタなど）には、CPU のより多くの処理タスクを担い、Agilent ChemStation オンラインセッションでの使用にはお勧めしません。

Agilent ChemStation で最良の印刷結果を得るには、HP LaserJet プリンタを使用してください。印刷必要量が少ない場合、高性能 HP Deskjet プリンタも使用できます。推奨プリンタのドライババージョンに関する情報については、readme.txt ファイルを確認してください。

Agilent Technologies は、Windows 環境でサポートされているすべてのプリンタおよびプリンタドライバの組み合わせをテストしているわけではありません。その他のメーカーのプリンタおよび適合したドライバでは、印刷性能や結果が変わることがあります。

『22 ページ 図　表 1』に記載されているプリンタは、このハンドブックの出版時にテストされています。

表 1　Successfully tested Printers

Printer Model	Driver comment
Canon LBP-430 LIPS 4	ドライバコメント
Canon LBP-450 LIPS 4	ドライバ
Canon LBP-470 LIPS4	ドライバ
Canon LBP-1310 LIPS 4	ドライバ
Canon LBP-3410 LIPS	ドライバ
PDF-XChange	バージョン 4.0, ChemStation のインストール時にインストールされます。

注記

このリストは包括的なものではなく、このハンドブックのリリース後に入手可能になったプリンタとプリンタドライバは含まれていないことに注意してください。お使いのプリンタがこのリストにない場合も、Agilent ChemStation で動作しないという意味ではなく、テストされていないだけです。

アドバンストパワーマネージメント（分析ハードウェアではサポートしません）

多くの最新 PC の BIOS やオペレーティングシステムは、アドバンストパワーマネージメント (APM) をサポートしています。一定のアイドル時間が経過すると、BIOS によってハードディスクその他のデバイスの電源がオフになり、システムはスタンバイモードに切り替えられます。これによって、PC の消費電力と内部クロック周波数を低下させ、消費エネルギーを節約します。

内部クロック速度を低下させ、ハードディスクの速度を抑制すると、PC は、機器コントロールとデータ取得の要求をリアルタイムに処理できなくなります。通常、これは、内部機器バッファのオーバーフロー、つまりデータ紛失の原因になります。したがって、分析ハードウェアのオンライン操作を実行中のシステムでは APM をオフにしておくことをお勧めします。

オペレーティングシステムの要件

ChemStation リビジョン B.04.02 には英語のほかに、日本語および中国語のローカライズバージョンもあります。ご利用の ChemStation に応じて、以下の対応する Microsoft Windows XP Professional（**サービスパック 3**）または Microsoft Windows Vista Business（**サービスパック 2**）オペレーティング システムが必要になります：

- 英語版 Microsoft Windows XP Professional（**サービスパック 3**）
- 日本語版 Microsoft Windows XP Professional（**サービスパック 3**）
- 中国語版 Microsoft Windows XP Professional（**サービスパック 3**）
- 英語版 Microsoft Windows Vista Business（**サービスパック 2**）
- 日本語版 Microsoft Windows Vista Business（**サービスパック 2**）
- 中国語版 Microsoft Windows Vista Business（**サービスパック 2**）

注記 アジレントは、これ以外の非英語オペレーティングシステムに対してサポートは行いません。

Windows XP Professional や Windows Vista Business (32 bit) は、Agilent ChemStation データ取り込みおよび解析ソフトウェアで唯一サポートされているオペレーティングシステムです。

サポートしているオペレーティングシステムの最新情報については、最寄りのサービスセンターまたはサポートセンターまでお問い合わせください。

LAN を使用して分析機器に接続する場合は、Microsoft TCP/IP プロトコルをインストールして設定する必要があります。

LC 機器のファームウェア要件

LC ChemStation ソフトウェアでは、『25 ページ 図　表 2』および『33 ページ 図　表』で示されたデバイスで動作させるために**最低限**のファームウェアリビジョンが必要になります。

注記

1 つの機器で複数の 1100/1200 モジュールを使用する場合は、モジュール全体のファームウェアが、次のテーブルに示された最低限の要件を満たすファームウェアで実行される必要があります。

1100/1200 LC 機器ファームウェア要件

Agilent 1100/1200 シリーズの LC モジュールにはフラッシュ ROM メモリが搭載されています。ファームウェアアップデートは、インターネットで配布されます。最新のファームウェアは、次のアジレントのウェブサイトからダウンロードできます。http://www.chem.agilent.com/scripts/cag_firmware.asp ファームウェア A.06.0x/B.01.0x から、新しいファームウェアアップデートツールが用意され、Agilent ChemStation Software DVD で配布されるようになりました。

表 2　LC 1100/1200 シリーズ機器のファームウェア要件

LC 機器	製品番号	ファームウェアリビジョン
サンプラ		
Agilent 1100/1200 オートメーションインタフェース	G2254A	A.06.10 以降
Agilent 1100 オートサンプラ	G1313A	A.06.10 以降
Agilent 1100/1200 サーモスタットオートサンプラ	G1329A	A.06.10 以降
Agilent 1200 サーモスタットオートサンプラ SL	G1329B	A.06.10 以降
Agilent 1100 マイクロサンプラ	G1389A	A.06.10 以降

表 2　LC 1100/1200 シリーズ機器のファームウェア要件

LC 機器	製品番号	ファームウェアリビジョン
Agilent 1100/1200 分取オートサンプラ	G2260A	A.06.10 以降
Agilent 1100 ウェルプレートオートサンプラ	G1367A	A.06.16 以降
Agilent 1200 高性能オートサンプラ	G1367B	A.06.16 以降
Agilent 1200 高性能オートサンプラ SL	G1367C	A.06.16 以降
Agilent 1200 高性能オートサンプラ SL Plus	G1367D	A.06.16 以降
Agilent 1100 サーモスタットウェルプレートオートサンプラ	G1368A	A.06.10 以降
Agilent 1100/1200 マイクロウェルプレートオートサンプラ	G1377A	A.06.16 以降
Agilent 1100/1200 サーモスタットマイクロウェルプレートオートサンプラ	G1378A	A.06.10 以降
Agilent 1100/1200 デュアルループオートサンプラ PS	G2258A	A.06.16 以降
Agilent 1290 Infinity 高性能オートサンプラ	G4226A	A.06.30 以降
カラムコンパートメント		
Agilent 1100/1200 カラムコンパートメント	G1316A	A.06.10 以降
Agilent 1200 カラムコンパートメント SL	G1316B	A.06.10 以降
Agilent 1290 Infinity カラムコンパートメント	G1316C	A.06.30 以降
Agilent 1100/1200 チップキューブインタフェース	G2240A	A.06.11 以降
ポンプ		
Agilent 1100/1200 アイソクラティックポンプ	G1310A	A.06.10 以降
Agilent 1100/1200 クォータナリポンプ	G1311A	A.06.10 以降

表 2　LC 1100/1200 シリーズ機器のファームウェア要件

LC 機器	製品番号	ファームウェアリビジョン
Agilent 1100/1200 バイナリポンプ	G1312A	A.06.10 以降
Agilent 1200 バイナリポンプ SL	G1312B	A.06.11 以降
Agilent 1290 Infinity バイナリポンプ	G4220A	B.06.30 以降
Agilent 1100/1200 キャピラリポンプ	G1376A	A.06.11 以降
Agilent 1100/1200 分取ポンプ	G1361A	A.06.11 以降
Agilent 1100/1200 ナノポンプ	G2226A	A.06.11 以降
検出器		
Agilent 1100 DAD	G1315A	A.06.10 以降
Agilent 1100/1200 DAD	G1315B	A.06.10 以降
Agilent 1100/1200 DAD SL	G1315C	B.06.30 以降[1]
Agilent 1200 DAD	G1315D	B.06.30 以降[2]
Agilent 1290 Infinity DAD	G4211A	A.06.10 以降
Agilent 1100 MWD	G1365A	A.06.10 以降
Agilent 1100/1200 MWD	G1365B	A.06.10 以降
Agilent 1100/1200 MWD SL	G1365C	B.06.30 以降[1]
Agilent 1200 MWD	G1365D	B.06.10 以降[2]
Agilent 1100/1200 FLD	G1321A	A.06.11 以降
Agilent 1100 VWD	G1314A	A.06.13 以降
Agilent 1200 VWD	G1314B	A.06.13 以降
Agilent 1200 VWD SL	G1314C	A.06.13 以降
Agilent 1200 VWD	G1314D	B.06.25 以降[3]
Agilent 1200 VWD SL Plus	G1314E	B.06.25 以降[3]

表 2　LC 1100/1200 シリーズ機器のファームウェア要件

LC 機器	製品番号	ファームウェアリビジョン
Agilent 1100/1200 RID	G1362A	A.06.10 以降
Agilent 1100/1200 UIB	G1390A	A.06.10 以降
フラクションコレクタ		
Agilent 1100 フラクションコレクタ	G1364A	A.06.10 以降
Agilent 1100/1200 フラクションコレクタ PS	G1364B	A.06.10 以降
Agilent 1100/1200 フラクションコレクタ AS	G1364C	A.06.10 以降
Agilent 1100/1200 マイクロフラクションコレクタ	G1364D	A.06.10 以降
バルブ		
2 ポジション /10 ポートバルブ	G1157A	A.06.10 以降
2 ポジション /6 ポートバルブ	G1158A	A.06.10 以降
2 ポジション /6 ポートバルブ SL	G1158B	A.06.10 以降
6 ポジション切り替えバルブ	G1159A	A.06.10 以降
12 ポジション /13 ポート切り替えバルブ	G1160A	A.06.10 以降
2 ポジション /6 ポートマイクロバルブ	G1162A	A.06.10 以降
2 ポジション /10 ポートマイクロバルブ	G1163A	A.06.10 以降
Agilent 1290 Infinity Flexible Cube	G4227A	C.06.30 以降
その他		
Agilent 1100/1200 デガッサ	G1322A	すべてのリビジョン

表 2　LC 1100/1200 シリーズ機器のファームウェア要件

LC 機器	製品番号	ファームウェアリビジョン
Agilent 1100 マイクロデガッサ	G1379A	すべてのリビジョン
Agilent 1200 マイクロデガッサ	G1379B	すべてのリビジョン
Agilent 1100/1200 マニュアルインジェクタ	G1328B	すべてのリビジョン
Agilent 1100/1200 温度調節機能付きサンプラ / フラクションコレクタ	G1330B	すべてのリビジョン
Agilent 1100 ローカルユーザーインタフェース (A.02.03)	G1323A	A.05.xx[4]
Agilent 1100/1200 ローカルユーザーインタフェース (B.03.22 以下)	G1323B	A.05.xx
Agilent 1100/1200 ローカルユーザーインタフェース (B.04.02 以上)	G1323B	A.06.01/02/05/1x; B.01.02/06/1x; B.06.2x
Agilent 1100/1200 コントロールモジュール インスタントパイロット	G4208A	B.02.09 以降
Agilent 1200 SFC Fusion A5	G4301A	ハードウェア出荷時の CD のファームウェアを使用

[1] Agilent G1315C DAD および G1365C MWD モジュールには、最小ファームウェア B.01.02 が必要となります。このファームウェアは、A.06.02 またはそれ以上のファームウェアのみと互換性があります。1100/1200 スタックで G1315C/G1365C を使用する場合は、ファームウェア A.06.02 以降を使用してスタック全体で互換性を持たせる必要があります。

[2] Agilent G1315D DAD および G1365D MWD モジュールには、最小ファームウェア B.01.04 が必要となります。このファームウェアは、A.06.02 またはそれ以上のファームウェアのみと互換性があります。1100/1200 スタックで G1315D/G1365D を使用する場合は、ファームウェア A.06.02 以降を使用してスタック全体で互換性を持たせる必要があります。

[3] Agilent G1314D および G1413E VWD モジュールには最小ファームウェア B.06.20 が必要となります。このファームウェアは、ファームウェア A.06.1x またはそれ以上のみと互換性があります。1100/1200 スタックで G1314D/E を使用する場合は、ファームウェア A.06.1x 以降を使用してスタック全体で互換性を持たせる必要があります。

[4] Agilent 1100 ローカルユーザーインタフェース G1323A は、以下のモジュールとの組み合わせがサポートされます。G1310A、G1311A、G1312A ポンプ、G1313A ALS、G1314A VWD、G1315A DAD、G1316A TCC、G1321A FLD

1120 Compact LC ファームウェア要件

LC ChemStation ソフトウェアでは、1120 compact LC 用ファームウェア B.06.2x が必要になります。

GC 機器ファームウェア要件

GC ChemStation ソフトウェアでは、以下に示されたデバイスを用いて動作するため**最低限**のファームウェアリビジョンが必要です。

表 3　GC 機器のファームウェア要件

GC 機器	製品番号	ファームウェアリビジョン	部品番号
GC システム			
Agilent 7890A GC システム	G3440A	A.01.10.3	該当なし[1]
Agilent 7820A GC システム	G4350A	7820A.01.10.013.1.bin - 英語、中国語、日本語に対応。 7820A.01.10.013.Ru.bin - ロシア語に対応。	該当なし
Agilent 6890N	G1530N、G1540N	7693A サポートには N.06.07、 LAN アセンブリ 04.7B3 には N.05.06	n.a.[1]
Agilent 6890Plus、6890A	G1530A、G1540A	A.03.08	G1530-61706
Agilent 6850N シリーズ GC シリアル # >= US10243001	G2630A	7693A サポートには N.06.07、LAN アセンブリ 04.7B3 には A.05.06	n.a.[1]
Agilent 6850 シリーズ GC シリアル # <= US00003200	G2630A	7693A サポートには A.03.07 および A.03.03	n.a.[1]
Agilent 6850 ハンドヘルドコントローラ	G2629A	A.05.06（7693A でのサポートなし）	n.a.[1]
GC オートサンプラ			
7693A インジェクタ	G4513A	A.10.02	n.a.[1]
7683B オートインジェクタ	G2913A	A.11.03	n.a.[1]

表 3 GC 機器のファームウェア要件

GC 機器	製品番号	ファームウェアリビジョン	部品番号
7673C オートインジェクタ	G1513A	A.09.15	n.a.[1]
7683A/6890 Plus ALS インタフェースボード	G2612A	A.02.01	n.a.[1]
7683A オートインジェクタモジュール	G2613A	A.10.07	n.a.[1]
6850 オートサンプラ	G2880A	A.10.05	n.a.[1]
GC トレイ			
7693A トレイ	G4514A	A.10.11	n.a.[1]
7673C トレイ	18596C	リビジョンなし	
5890 用 7683 ALS トレイ	G2916A	A.02.01	n.a.[1]
7683A トレイモジュール	G2614A	A.02.01	n.a.[1]
バーコード			
BCR/Mixer	G4515A	A.10.03	n.a.[1]
BCR/Mixer	G2615A	リビジョンなし	
BCR/Mixer	G1926A	リビジョンなし	
GC コントローラ			
7693A ALS カードの 6890Plus へのアップグレード	G4517A	A.01.01	n.a.[1]
6890A の 7693A Touchstone 2 アクセサリ	G4516A	A.01.01	n.a.[1]
7673C ALS コントローラ	G1512A	A.01.12	n.a.[1]

表 3　GC 機器のファームウェア要件

GC 機器	製品番号	ファームウェアリビジョン	部品番号
A/D コンバータ			
35900E	35900E	E.01.02	n.a. [1]

[1] 7890A、7820A、6890N、6850 GC Systems、オートサンプラ（ALS）および 35900E 機器にはフラッシュ ROM メモリがあります。ファームウェアアップデートには、Agilent Instrument Utilities または Agilent Lab Advisor のどちらかを使用してください。最新のファームウェアは、次のアジレントのウェブサイトからダウンロードできます。http://www.chem.agilent.com/scripts/cag_firmware.asp

追加の分析機器（ケーブル、分析機器への接続など）のインストールの詳細については、GC ChemStation のインストール マニュアルを参照してください。

35900E A/D コンバータのファームウェア要件

Agilent 35900E A/D コンバータにはフラッシュ ROM メモリが搭載されています。GC ファームウェアアップデートユーティリティは、ChemStation DVD の Support ディレクトリにあります。ファームウェアアップデートは、インターネットで配布されます。最新のファームウェアは、次のアジレントのウェブサイトからダウンロードできます。
http://www.chem.agilent.com/scripts/cag_firmware.asp

[A/D コンバータ]	製品番号	ファームウェアリビジョン
35900E		E.01.02

LC/MS 機器のファームウェア要件

LC/MS ChemStation ソフトウェアが以下に示されたデバイスとともに動作するためには、以下のファームウェアリビジョンが最低限必要です。

Agilent 6100 シリーズ LC/MS と Agilent 1100/1200 シリーズ LC/MSD のファームウェアは、ChemStation ソフトウェアの一部として提供されます。機器ファームウェアをアップデートするには、プログラム x:¥chem32¥ms¥firmware¥msupdate.exe（「x」は ChemStation ソフトウェアがインストールされているドライブの名前）を実行します。

表 4　LC/MS 機器のファームウェア要件

LC/MS 機器	製品番号	ファームウェアリビジョン
Agilent 6100 シリーズ LC/MSD	G6110A G6120A/B G6130A/B G6140A G6150B	3.02.26 以降

CE 機器のファームウェア要件

『35 ページ 図　表 5』に示されるデバイスで動作するため、GC ChemStation ソフトウェアには以下の最小ファームウェアリビジョンが必要です。

表 5　CE 機器のファームウェア要件

CE 機器	ファームウェアリビジョン
G1601A	
内蔵 DAD	リビジョン 1.2 以降
メインフレーム Agilent CE G1601A	リビジョン 2.3 以降
G7100	リビジョン B.06.25 以降

通信コンポーネント

LAN 通信の使用法

標準 TCP/IP プロトコルを用いて機器を接続する場合は、このプロトコルを PC のネットワークプロトコルとしてインストールしておく必要があります。分析機器を LAN に接続するために使用している LAN アセンブリ、Jet Direct、または G1369A LAN のカードの現在の設定は、アップグレード中でも保たれたままです。

GPIB コントロール機器から LAN 接続にアップグレードする場合は、必要な LAN 通信コンポーネントをインストールし、機器を再設定する必要があります。

LAN 通信を使用するユーザーまたは GPIB 接続から LAN 接続に移行するユーザーは、Agilent BootP Service を ChemStation リビジョン B.04.02 SP1 用の通信コンポーネントとして使用する必要があります。現在 CAG BootP Server を使用しているユーザーは、このコンポーネントを削除する必要があります。代わりに新しい Agilent BootP サービスをインストールする必要があります。CAG BootP Server のサポートは終了しました。Agilent BootP サービスプログラムは、ChemStation DVD に用意されています。

GPIB および USB-GPIB 通信の使用

GPIB 経由の Agilent ChemStation リビジョン A.xx.xx で通信する分析機器では、ChemStation リビジョン B.04.0x との通信で GPIB 接続の使用を続けることがあります。さらに、USB-GPIB インタフェースを使用することもできます。詳細は、『37 ページ 図　表 6』を参照してください。

注記

GPIB コミュニケーションを使用する Agilent LC 1100 および 35900E はサポートされません。これらのシステムは、Agilent ChemStation リビジョン B.04.0x にアップグレードする前に、LAN 接続にアップグレードする必要があります。

表 6　GPIB および分析ハードウェア互換性マトリックス

機器タイプ	Agilent 82350 A	Agilent 82350 B	Agilent USB-GPIB インタフェース 82357A	Agilent USB-GPIB インタフェース 82,357B
Agilent 1100/1200 LC	N	N	N	N
Agilent 1120 Compact LC	N	N	N	N
HP 5890 GC、4890D GC	N	Y	N	Y
Agilent 7890A GC システム	N	N	N	N
Agilent 7820A GC システム	N	N	N	N
Agilent 6890N GC	N	N	N	N
Agilent 6890A および 6890 Plus GC	N	Y	N	Y
Agilent 6850 GC	N	N	N	N
G1600A キャピラリ電気泳動	Y	Y	Y	Y
7100 キャピラリー電気泳動	N	N	N	N
35900E	N	N	N	N

注意

電子ボードおよび部品は、静電気放電（ESD）に敏感です。

ESD により電子ボードや部品を損傷する恐れがあります。

➔ 必ずボードの端を持ち、電子部品を触れないでください。電子ボードや部品を取り扱う際は、必ず静電気防護具（静電気防止ストラップなど）を使用してください。

GPIB カード、USB-GPIB インタフェースおよび関連機器パラメータの設定に必要な手順は、対応するクロマトグラフ固有の技術の『ChemStation のインストール』マニュアルに記載されています。

GPIB システムを制御するための SICL ライブラリのインストールを説明しているマニュアルは、ChemStation DVD-ROM の Manual/Installation フォルダにあります。

3 Agilent ChemStation リビジョン B.04.02 へのアップグレード方法

ChemStation Plus の場合： 41
ChemStation システムの一般的なアップグレード手順 41
ChemStation リビジョン B.01.01 ～ B.04.02 から リビジョン B.04.02 への自動アップグレード 42
ChemStation リビジョン A.xx.xx からリビジョン B.04.02 へのマニュアルアップグレード 46
機器固有のアップグレードの説明 48
LC 固有のアップグレード説明 48
GC 固有のアップグレードの説明 48
LC/MS 固有のアップグレード説明 49
CE および CE/MS 固有のアップグレード説明 49
アドオンソリューションを含む ChemStation システムのアップグレード手順 50
ChemStation B.04.02 でサポートされているアドオン製品 51
アドオンソリューションがインストールされた状態でのアップグレード方法 53
アドオンソリューションを含む ChemStation リビジョン B.0x.0x からのアップグレード 53
アドオンソリューションを含む ChemStation リビジョン A.xx.xx からのアップグレード 56
一般的なアドオンソリューション 61
LC 固有のアドオンソリューション 62
GC 固有のアドオンソリューション 62
機器の設定 64

3 Agilent ChemStation リビジョン B.04.02 へのアップグレード方法
通信コンポーネント

この章では、Agilent ChemStation リビジョン B.04.02 へアップグレードする方法について説明します。アップグレード中のアドオンソリューションの取り扱いについても説明します。

ChemStation Plus の場合：

ChemStation システムの一般的なアップグレード手順

注記 システムをアップグレードする前に、システム全体をバックアップしておくことを強くお勧めします。

注記 アップグレードを開始する前に、アップグレードに関するセクションと機器固有のアップグレード情報を注意深く読んでください。アドオンソリューションソフトウェアをインストールしている場合は、アップグレード作業を開始する前に『「アドオンソリューションを含む ChemStation システムのアップグレード手順」50 ページ 図』のセクションを読んでください。アドオンソリューションが ChemStationB.04.02 でサポートされていることを確認してください。GPIB 通信を使用している場合は、アップグレード作業を開始する前に 『「通信コンポーネント」36 ページ 図』のセクションをお読みください。

ChemStation リビジョン B.04.0x でのライセンス

ChemStation リビジョン A.xx.xx ライセンス番号は、通常は、ChemStation リビジョン B.04.0x にアップグレードできます。さらに、ChemStation リビジョン A.xx.xx を購入したライセンス番号を使用して新しいインストールを実行できます。

Agilent Training ライセンス（tx0000xxxx）は、ChemStation リビジョン B.04.0x では無効です。トレーニングライセンスを使用してシステムをインストールしている場合は、アップグレード前またはアップグレード中に、「ライセンス追加」ユーティリティを使用して有効な完全ライセンスをインストールする必要があります。

ChemStation リビジョン B.01.01 ～ B.04.02 から リビジョン B.04.02 への自動アップグレード

ChemStation DVD のインストールルーチンを用いて、既存の ChemStation リビジョン B.01.01 および B.03.02 を、リビジョン B.04.02 に直接アップグレードすることができます。

インストールウィザードで現在の ChemStation がアンインストールされ、新しいバックアップディレクトリにバックアップコピーが保存されます。元のインストールディレクトリ名は、このディレクトリを作成するために使用されます。デフォルトでは CHEM32_001 です。以前のインストールディレクトリからのすべてのファイルは、このディレクトリに保存されます。

アップグレード インストールの後で、以前コンフィグされた機器が使用可能になります。これらを再度コンフィグする必要はありません。[**機器追加**] ツールを用いて、追加機器を加えることができます。詳細については、『ChemStation のインストール』マニュアルを参照してください。

注記

ChemStationB.04.02 は、Windows XP と Windows Vista でのみサポートされています。古いバージョンの ChemStation B.0x.0x は Windows 2000 でサポートされてきたため、ChemStation B.04.02 にアップグレードするには、ChemStation アップグレード前にオペレーティングシステムを更新する必要があります。『「最低限の PC 要件」19 ページ 図』を参照し、PC の最小要件も確認してください。

注記

サービスリリースまたはパッチをインストールした ChemStation リビジョン B.0x.0x をアップグレードする場合、Windows の [**プログラムの追加と削除**] ツールによりサービスリリースやパッチを削除するか、削除せずにアップグレードをインストールすることができます。アップグレード前にパッチやサービスリリースが削除されない場合、パッチを含む以前のバージョンの ChemStation を正しくアップグレードしても、アップグレード後に [**プログラムの追加と削除**] の対応するエントリはまだ存在する可能性があります。これらのエントリを後から削除することはやめてください。

注記

アップグレードを開始する前に、すべてのプログラムを終了し、システムを再起動します。

1 DVD ドライブに ChemStation DVD-ROM を挿入します。

2 タスクバーの［スタート］メニューから［**スタート**］> >［**ファイル名を指定して実行**］または［**スタート**］> >［**検索**］を選択します。

3 コマンドラインに、次のように入力します。
x:¥Install¥Setup.exe（x は DVD ドライブの名前）。そして［OK］をクリックします。

注記

Agilent ChemStation B.04.02 では、Microsoft .NET Framework 3.5 SP1 と PDF-XChange 4.0 がインストールされていることを要件とします。Microsoft .NET Framework によって、使用するアプリケーションのセキュリティと速度が改善され、さまざまなプログラミング言語のプログラムの基盤が生成されます。ChemStation では、［**レポート条件**］および［**シーケンス出力**］ダイアログで、ファイルタイプ .PDF を表示するために PDF-XChange 4.0 が必要です。コンピュータにこれら 2 つの必須アプリケーションがインストールされていない場合は、インストールすることを要求されます。対応するダイアログで、［**インストール**］ボタンを押します。Microsoft .Net Framework 3.5 SP1 については、ライセンス契約に同意することも必要です。

4 リビジョン B.04.0x のセットアップウィザードが起動し、アップグレードプロセスを案内します。ようこそ画面で、セットアップウィザードにより必要なディスク空き容量を計算するまで待った後、[**次へ**] を押します。

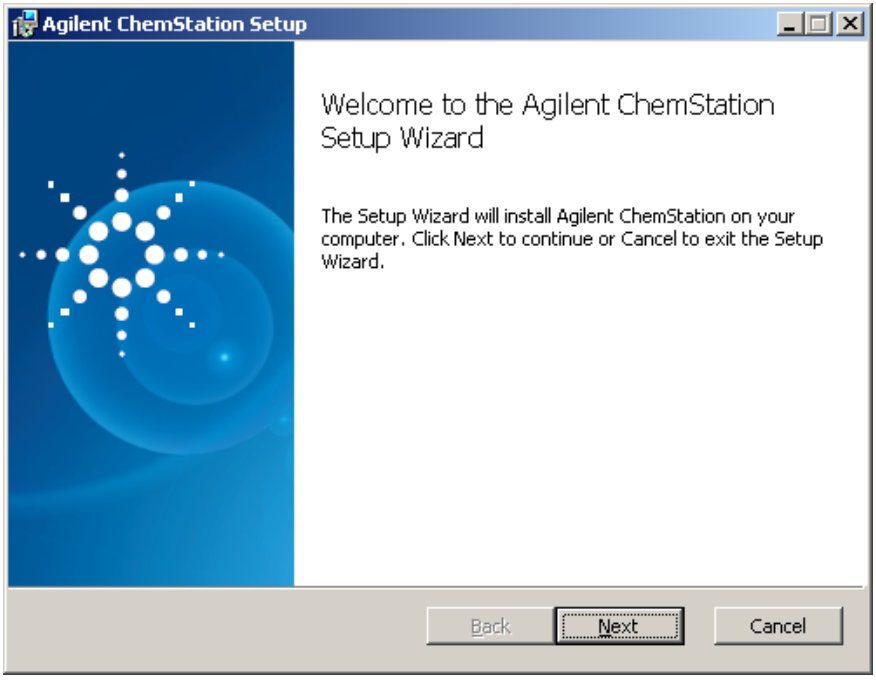


図 1　　Agilent ChemStation セットアップダイアログ

5 [エンドユーザーライセンス契約] 画面で、ライセンス契約を読んだ後、[**ライセンス契約の規約に同意します**] を選択します。[**次へ**] を押して続行します。

6 [アップグレード インストール] 画面で、ステップアップウィザードにより ChemStation の以前のバージョン B.0x.0x を検出したことをユーザーに知らせます。現在のインストールディレクトリのバックアップを作成し、新しいリビジョン B.04.0x がインストールされることをユーザーに知らせます。[**次へ**] を押して続行します。

7 次の画面で、セットアップウィザードはアップグレードインストールを開始する準備が整ったことをユーザーに知らせます。[**インストール**] を押して、インストールプロセスを開始します。インストールプロセス中、セットアップウィザードは以前の ChemStation インストールディレ

クトリのファイルをバックアップホルダ CHEM32_001 に移動し、レジストリ、Windows パス変数、ChemStation.ini ファイルからすべての ChemStation 関連エントリを削除します。

その後、新しい ChemStation B.04.02 ファイルがインストールされます。最後に、セットアップウィザードは旧バージョンで使われていたライセンス、機器コンフィグレーション、旧インスタレーションのファイルを復元します。

8 アップグレード プロセスの終了時に、[**完了**] を押し、アップグレードインストールを完了します。

9 ソフトウェア アップグレードはこれで完了です。DVD を取り出して、安全な場所に保管します。

10 IQT レポートを実行し、アップグレード インストールを確認します。IQT レポートの詳細は、該当する『ChemStation のインストール』マニュアルに記載されています。

追加のアップグレード説明

アップグレードインストール中、セットアップウィザードはユーザーが作成したファイルをバックアップフォルダ Chem32_001 から新しいインストールフォルダに移動します。これは、ChemStation ユーザーが作成したすべてのファイルを対象とします。ユーザーがファイルをデフォルトディレクトリに保存する場合、各ファイルの保存場所は以下のとおりです。

- Chem32¥x¥data¥*.d ファイル： ユーザー作成データファイル
- Chem32¥x¥methods¥*.m ファイル： ユーザー作成メソッド
- Chem32¥x¥sequences¥*.s ファイル： ユーザー作成シーケンス
- Chem32¥x¥hypersequences¥*.hyp ファイル： ユーザー作成ハイパーシーケンス
- Chem32¥x¥verify¥*.val ファイル： ユーザー作成システムベリフィケーションテスト

さらに、以下のデフォルトの場所に保存される場合、ユーザー作成スペクトルライブラリファイルも移動されます。

- Chem¥speclibs¥*.uvl ファイル： ユーザー作成 UV ライブラリファイル

データファイル、メソッド、シーケンス、スペクトルライブラリのファイルタイプのデフォルトパスがコンフィグレーションエディタで変更された場合、これらのファイルも新しいインストールフォルダにコピーされます。

ChemStation B.02.01 から始める場合、データファイル、メソッド、シーケンスのために追加パスを設定できます。これらのファイルが機器ディレクトリ chem32/x（ここで、x は機器番号）の下に位置しない場合、これらの追加位置のファイルはコピーされません。

以下のファイルは、存在する場合は、以下の ChemStation リビジョン B.04.0x での対応するパスに手動で移動する必要があります。

- Chem32¥repstyles¥*.frp ファイル： ユーザー作成レポートスタイル
- Chem32¥core¥*.mac, mcx ファイル： user.mac を含む特別にユーザーが作成したマクロファイル
- Chem32¥core¥*.xml: ユーザー作成 xml ファイル
- 使用する場合の追加マクロファイル

注記

カスタマイズされたマクロソリューションおよび user.mac 内のマクロは、Unicode ベースのエンコード変更の影響を受けることがあります。『「カスタマイズされたソリューションへの影響」113 ページ 図』を参照してください。

ChemStation リビジョン A.xx.xx からリビジョン B.04.02 へのマニュアルアップグレード

注記

ChemStation B.04.02 は、Windows XP と Windows Vista でのみサポートされています。ChemStation A.xx.xx から ChemStation B.04.02 にアップグレードする場合は、ChemStation を更新する前に、オペレーティングシステムをアップデートしておく必要があります。最低限の PC 要件（「『「最低限の PC 要件」19 ページ 図』」）も確認してください。

ChemStation リビジョン A.xx.xx は、ChemStation B.04.02 に自動的にはアップグレードできません。アップグレードするには、PC ハードウェアおよびソフトウェア要件の他に、ファームウェア要件もチェックする必要があります。前提条件を満たしている場合は、データをバックアップし、現在の ChemStation リビジョンをアンインストールした後に、リビジョン

B.04.0x のセットアップウィザードを実行します。他のアップグレード方法としては、サポートされているクリーンなシステムで ChemStation リビジョン B.04.0x をインストールすることです。

インストール後に、必要なユーザー作成ファイルを適切なディレクトリに手作業で移動します。必要なデータをすべてバックアップしてください。リビジョン B.04.0x 内でメソッド、シーケンスなどを読み込むと、新しいファイル形式で保存されます。ChemStation リビジョン B.04.0x で保存されたファイルは、ChemStation リビジョン A.xx.xx での下位互換性はありません。

機器固有のアップグレードの説明

LC 固有のアップグレード説明

LC 1100 モジュール通信

以下の HPLC 1100/1200 固有のファイルはアップグレードされた ChemStation に移動されます。

- chem32¥x¥clusterx.mth: クラシック LC ドライバ利用の際の、LC 1100/1200 モジュール用のシステムが作成したコンフィグレーションファイル

  または

- RapidControl.InstrumentConfig.xml:LC 用 RC.NET ドライバ利用の際の、LC 1100/1200 モジュール用のシステムが作成したコンフィグレーションファイル

ウェルプレートコンフィグレーション

以下のウェルプレートサンプラ固有のファイルが機器サブディレクトリ下のディレクトリに保存される場合、これらのファイルはアップグレードされた ChemStation に移動されます。

- chem32¥x¥*.wpt files: ユーザー作成のウェルプレート定義ファイル

GC 固有のアップグレードの説明

HeadSpace、CTC PAL Autosampler、SimDis、LTM ソフトウェアのようなアドオン製品は、ChemStation ソフトウェアをアップグレードする前にアンインストールしておく必要があります。

Companion は B.02.01 からの GC ChemStation に含まれるようになり、独立したアドオン製品ではなくなりました。

Retention Time Locking は、B.01.0x と B.02.0x ではアドオンプログラムとしてインストールされていました。これらのリビジョンではアップグレードする前に、[コントロールパネル] の [プログラムの追加と削除] を使って RTL を削除しておく必要があります。リビジョン B.03.01 からは、RTL はアドオンではなくなったため、削除しておく必要はなくなりました。

35900E

G2072BA および G2073BA A/D 製品には、LAN 通信機能を備えた 35900E が必要です。

LC/MS 固有のアップグレード説明

LC/MSD ファームウェアの更新

Agilent 6100 シリーズ LC/MS と Agilent 1100/1200 シリーズ LC/MSD のファームウェアは、LC/MSD ChemStation ソフトウェアの一部に含まれます。リビジョン B.04.0x に LC/MSD ChemStation をアップグレードした後、LC/MSD ファームウェアを更新する必要があります。

機器ファームウェアを更新するには、まず LC/MSD ChemStation が終了しているか確認し、プログラム x:¥chem32¥ms¥firmware¥msupdate.exe （「x」は ChemStation ソフトウェアがインストールされた場所に相当するドライブ名 ） を実行します。

チューニングファイル

リビジョン B.04.0x LC/MSD ChemStation へのアップグレード後、両極性オートチューンを行い、機器のチューニングパラメータを再構築してください。

CE および CE/MS 固有のアップグレード説明

CE または CE/MS 固有のアップグレード説明はありません。

アドオンソリューションを含む ChemStation システムのアップグレード手順

注記

アップグレードの前に、インストールしていたアドオンソリューションが ChemStation B.04.02 でサポートされていることを確認します。サポートされているアドオンソリューションは、それぞれ最少のリビジョンと共に、「『51 ページ 図　表 7』」に記載されています。

アドオンソフトウェア製品はすべて、既存の ChemStation リビジョン B.01.01 以降から ChemStation リビジョン B.04.0x への自動アップグレード前に、アンインストールする必要があります。アドオン製品について、自動アップグレードはありません。以下の表には、それぞれのアドオン製品によって異なるアンインストール操作をまとめてあります。アドオンソフトウェアは、ChemStation をアップグレードした後に再インストールする必要があります。

アドオンソリューションのインストール中に、アドオンソリューションプログラムの環境を保存するために、特定の情報が ChemStation.ini ファイル（システムの WINDOWS ディレクトリ内にある）に書き込まれます。

アップグレードプロセス中、アップグレードプログラムはすべての chemstation.ini エントリを読み込み、このファイル内にあるエントリからアドオンソリューションを検出します。アドオンソリューションを前もって削除せずに ChemStation ソフトウェアをアンインストールすると、アップグレードプロセス中に警告が表示されます。

ChemStore または ChemAccess のような ChemStation Plus ファミリに属しているインストール済み製品は、標準の Windows アンインストール手順を使用してアンインストールする必要があります（[**スタート** > **設定** > **コントロールパネル** > **プログラムの追加と削除**]）。ChemStation をアップグレードする前に、Windows ルーチンを使用してこれらの製品をアンインストールします。

さらに、アドオンプログラムによっては、chemstation.ini ファイル内にアンインストール中には削除されないエントリを作成している場合があります。これらのエントリは、アドオンソリューションをアンインストールしてからアップグレードインストールをするまでの間に、chemstation.ini ファイルから手作業で削除する必要があります。

ChemStation B.04.02 でサポートされているアドオン製品

注記

アップグレードする前に、インストールしているアドオンソリューションが ChemStation B.04.0x でサポートされていることを確認します。すべてのアドオンソリューションソフトウェアが最初のリビジョンからサポートされているわけではありません。サポートされているアドオンソリューションは、「『51 ページ 図　表 7』」に記載されています。

ChemStation リビジョン B.04.02 でインストールがサポートされているアドオンソリューションのリビジョンについては、以下の表を参照してください。

表 7　ChemStation リビジョン B.04.02 でサポートされているアドオンソリューション製品

ChemStation リビジョン B.04.02 用のアドオンソリューション	ChemStation リビジョン B.04.02 に必要なリビジョン	ChemStation リビジョン B.03.01 からのアンインストール
G2181BA ChemStore クライアント / サーバー	B.04.02 データストレージモード：[**ユニークなデータコンテナ オン**] の場合のみ	chemstation.ini 内のエントリを含めて、コントロールパネルにある [**プログラムの追加と削除**] から完全にアンインストールします。
G2183BA セキュリティパック	B.04.02	ChemStore により、アンインストール
G2182BA GPC ゲル浸透クロマトグラフ	B.01.01	chemstation.ini 内のエントリを含めて、コントロールパネルにある [**プログラムの追加と削除**] から完全にアンインストールします。

表 7 ChemStation リビジョン B.04.02 でサポートされているアドオンソリューション製品

ChemStation リビジョン B.04.02 用のアドオンソリューション	ChemStation リビジョン B.04.02 に必要なリビジョン	ChemStation リビジョン B.03.01 からのアンインストール
G2080BA GC 用リテンションタイムロッキング	GC ChemStation により、インストールされます	RTL はアンインストールできません
GC コンパニオン	GC ChemStation により、インストールされます	コンパニオンはアンインストールできません
G3382AA GC システム用 CTC PAL オートサンプラコントロール	A.01.04	chemstation.ini 内のエントリを含めて、コントロールパネルにある［**プログラムの追加と削除**］から完全にアンインストールします。
G3383AA LC および LC/MS システム用 CTC PAL オートサンプラコントロール	A.01.04	chemstation.ini 内のエントリを含めて、コントロールパネルにある［**プログラムの追加と削除**］から完全にアンインストールします。
G2924AA GC 用統合ヘッドスペースソフトウェア	A.02.01	chemstation.ini 内のエントリを含めて、コントロールパネルにある［**プログラムの追加と削除**］から完全にアンインストールします。
GC 用 G7300AA イージー サンプル プレップ ソフトウェア	A.02.01	chemstation.ini 内のエントリを含めて、コントロールパネルにある［**プログラムの追加と削除**］から完全にアンインストールします。

アドオンソリューションがインストールされた状態でのアップグレード方法

アドオンソリューションを含む ChemStation リビジョン B.0x.0x からのアップグレード

Purity のようなアドオンソリューションがインストールされた ChemStations リビジョン B.0x.0x をアップグレードするために必要な手順は、以下のとおりです。

標準の Windows アンインストール手順を使用して、アドオンソリューションソフトウェアをアンインストールします（[**コントロールパネル** > **プログラムの追加と削除**]）。システムは、アンインストールプロセス中に、アンインストールしたアドオンソリューションプログラムに対応するアドオンソリューションエントリを削除します。システムにインストールされているアドオンソリューションが残っている限り、[**プログラムの追加と削除**] を用いて削除していく必要があります。

表 8　ChemStation リビジョン B.0x.0x アドオンソリューションのアンインストールの説明 - サマリ

ChemStation B.0x.0x 用のアドオンソリューション	リビジョン	ChemStation.ini 内のアドオンエントリ（[プログラムの追加と削除] でアンインストールを実行した後に、手作業で削除する必要がある場合があります）	Windows からのプログラムの追加と削除
G2181BA ChemStore クライアント / サーバー	B.03.02 SR1 以降	[PCS] ChemStore C/S =C:¥CHEM32¥ChemStor¥database [PCS, 装置番号] ADDONS=x（x はインストールされているアドオンの数です） ADDONx=C:¥CHEM32¥ChemStor¥hpdbif00.mcx ChemStore C/S =C:¥CHEM32¥ChemStor¥database	はい、chemstation.ini 内のすべての関連エントリを完全に削除します
G2183BA セキュリティパック	B.03.02 SR1 以降	win.ini 内にアドオンエントリなし	いいえ。ChemStore アンインストール中にアンインストールされます。
メソッドバリデーションパック	A.02.01 まで	[PCS, 装置番号] ADDONS=x（x はインストールされているアドオンの数です） ADDONx=C:¥CHEM32¥CORE¥hpca.mac MVPrevSeqFile=...MVPrevSeqPath=...MethodValidationMode=1	はい、chemstation.ini 内のすべての関連エントリを完全に削除します
G2080BA GC のリテンションタイムロッキング	B.01.02 B.01.03	[PCS, 装置番号] ADDONS=x（x はインストールされているアドオンの数です） ADDONx=C:¥CHEM32¥RTL¥RTLTOP.MAC	はい、chemstation.ini 内のすべての関連エントリを完全に削除します
GC コンパニオン	リビジョンなし	GC ChemStation に含まれます。コンパニオンはアンインストールできません。	いいえ

表 8 ChemStation リビジョン B.0x.0x アドオンソリューションのアンインストールの説明 - サマリ

ChemStation B.0x.0x 用のアドオンソリューション	リビジョン	ChemStation.ini 内のアドオンエントリ（[プログラムの追加と削除] でアンインストールを実行した後に、手作業で削除する必要がある場合があります）	Windows からのプログラムの追加と削除
G2924AA GC の積分されたヘッドスペースソフトウェア	A.01.04 以降	[PCS, 装置番号] ADDONS=x（x はインストールされているアドオンの数です） ADDONx=C:¥CHEM32¥HS¥HSAddon.MAC	はい。ただし、chemstation.ini からアドオンエントリを手作業で削除する必要があります
G2887BA GC 用 SimDis ソフトウェア	A.02.01 以降	[PCS, 装置番号] ADDONS=x（x はインストールされているアドオンの数です） ADDONx=C:¥CHEM32¥Core¥SDSetup.MAC	はい、chemstation.ini 内のすべての関連エントリを完全に削除します
G6586AA GC 用低熱容量 (LTM) ソフトウェア	A.01.01 以降	[PCS, 装置番号] ADDONS=x（x はインストールされているアドオンの数です） ADDONx=C:¥CHEM32¥LTM¥LTMAddon.MAC	はい、chemstation.ini 内のすべての関連エントリを完全に削除します
G3382AA GC システム用 CTC PAL オートサンプラコントロール	A.01.01 以降	[PCS, 装置番号] ADDONS=x（x はインストールされているアドオンの数です） ADDONx=C:¥Chem32¥CTC¥CTC_TOP.MAC	
G3383AA LC および LC/MS システム用 CTC PAL オートサンプラコントロール	A.01.01 以降	[PCS, 装置番号] ADDONS=x（x はインストールされているアドオンの数です） ADDONx=C:¥Chem32¥CTC¥CTC_TOP.MAC	
G2924AA GC の積分されたヘッドスペースソフトウェア	A.01.04 以降	[PCS, 装置番号] ADDONS=x（x はインストールされているアドオンの数です） ADDONx=C:¥CHEM32¥HS¥HSAddon.MAC	はい。ただし、chemstation.ini からアドオンエントリを手作業で削除する必要があります

アドオンソリューションを含む ChemStation リビジョン A.xx.xx からのアップグレード

GC コンパニオンのようなアドオンソリューションがインストールされている ChemStations A.xx.xx をアップグレードするのに必要な手順は、以下のとおりです。

1 標準の Windows アンインストール手順を使用して、追加ソリューションソフトウェアをアンインストールします（[**コントロールパネル**] > [**追加 / 削除**] プログラム）。

2 タスクバーの [**スタート**] メニューから[**スタート**] > [**ラン**]を選択します。

3 コマンドラインに Win.ini を入力して、[OK] をクリックします。
win.ini ファイルが開きます。

4 インストールされている装置の数が x で示されている [PCS] および [PCS,x] セクション内で、アドオンソリューション関連エントリを検索します。たとえば、ChemStation コンパニオンの場合、ADDONS=1 ADDON1=C:.mac。追加ソリューションがシステムにインストールされている場合は、変数 ADDONS=x は増加し、インストールされている追加ソリューションの数が表示されます。

注記 インストールされているアドオンソリューション関連の win.ini エントリは、『57 ページ 図　表 9』に記載されています。

5 アンインストールしたアドオンソリューションプログラムに対応するアドオンソリューションエントリを削除します。システムにインストールされているアドオンソリューションがまだ残っている場合は、変数 ADDONS=x の値が減って、残りのアドオンソリューション数が示されます。アドオンプログラムはそれぞれ個別にアンインストールする必要があります。

注記 win.ini エントリの詳細は、アドオンソリューション製品の、対応するソフトウェアマニュアルを参照してください。

6 win.ini ファイルを保存して終了します。

7 アドオンプログラムすべてが削除されたことを確認するか、ステップ 1 を続行して、アドオンソリューションをさらにアンインストールします。

8 ChemStation データをバックアップします。

9 現在インストールされている ChemStation リビジョン A.xx.xx の『ChemStation のインストール』マニュアルに従い、ChemStation をアンインストールします。

10 ChemStation B.04.02 をインストールします。

表 9 ChemStation リビジョン A.xx.xx アドオンソリューションのアンインストールの説明 ― 要約

ChemStation A.xx.xx についてのアドオンソリューション	リビジョン	Win.ini のアドオンエントリ（[プログラムの追加と削除] でアンインストールを実行した後、手動での削除が必要なことがあります）	Windows からのプログラムの追加と削除
ChemStore クライアント / サーバー	B.03.02 以前	[PCS] ChemStore C/S =C:¥HPCHEM¥ChemStor¥database [PCS, 装置番号] ADDONS=x（x はインストールされているアドオンの数です） ADDONx=C:¥HPCHEM¥ChemStor¥hpdbif00.mcx ChemStore C/S =C:¥HPCHEM¥ChemStor¥database	はい。ただし、アドオンエントリを win.ini から手動で削除する必要があります
セキュリティパック	B.03.02 以前	win.ini 内にアドオンエントリなし	いいえ。ChemStore アンインストール中にアンインストールされません。

表 9 ChemStation リビジョン A.xx.xx アドオンソリューションのアンインストールの説明 ― 要約

ChemStation A.xx.xx についてのアドオンソリューション	リビジョン	Win.ini のアドオンエントリ（[プログラムの追加と削除] でアンインストールを実行した後、手動での削除が必要なことがあります）	Windows からのプログラムの追加と削除
Purify	A.02.01 まで	[PCS, 装置番号] ADDONS=x (x はインストールされているアドオンの数です) ADDONx=C:¥Purify¥bin¥inl_puri.mcx [Purify] バージョン = xx.xx Path=c:¥Purify	はい、win.ini のすべての関連エントリを完全に削除します
ChemAccess	A.02.01 まで	[PCS, 装置番号] ADDONS=x (x はインストールされているアドオンの数です) ADDONx=C:¥HPCHEM¥CORE¥hpca.mac	はい。ただし、アドオンエントリを win.ini から手動で削除する必要があります
メソッドバリデーションパックめそっどばりでーしょんぱっく	A.02.01 まで	[PCS, 装置番号] ADDONS=x (x はインストールされているアドオンの数です) ADDONx=C:¥HPCHEM¥CORE¥hpca.mac MVPrevSeqFile=... MVPrevSeqPath=... MethodValidationMode=1	はい。ただし、アドオンエントリを win.ini から手動で削除する必要があります
GPC	A.02.02 以前	[PCS, 装置番号] ADDONS=x (x はインストールされているアドオンの数です) ADDONx=C:¥HPCHEM¥GPC¥Gpc_top.mac そして、インストールディレクトリから GPC ファイルを手動で削除する必要があります。GPC ソフトウェアの readme.txt を参照してください。	できません。手動で削除してください。

表 9　ChemStation リビジョン A.xx.xx アドオンソリューションのアンインストールの説明 ― 要約

ChemStation A.xx.xx についてのアドオンソリューション	リビジョン	Win.ini のアドオンエントリ（[プログラムの追加と削除] でアンインストールを実行した後、手動での削除が必要なことがあります）	Windows からのプログラムの追加と削除
イージーアクセス	A.03.00 以前	[PCS, 装置番号] ADDONS=x（x はインストールされているアドオンの数です） ADDONx=C:¥HPCHEM¥CORE¥ezxmmain.mac	はい、win.ini のすべての関連エントリを完全に削除します
データブラウザ	A.01.02 以前	[PCS, 装置番号] ADDONS=x（x はインストールされているアドオンの数です） ADDONx=C:¥HPCHEM¥CORE¥aevgen.mac	はい、win.ini のすべての関連エントリを完全に削除します
G2080AA GC のリテンションタイムロッキング	A.05.02 A.06.01 B.01.01	[PCS, 装置番号] ADDONS=x（x はインストールされているアドオンの数です） ADDONx=C:¥HPCHEM¥RTL¥RTLTOP.MAC	はい。ただし、アドオンエントリを win.ini から手動で削除する必要があります
GC コンパニオン	リビジョンなし	[PCS, 装置番号] ADDONS=x（x はインストールされているアドオンの数です） ADDONx=C:¥HPCHEM¥PUI¥PUITOP.MAC	はい。ただし、アドオンエントリを win.ini から手動で削除する必要があります
G2401AA GC スタンドアローン用ヘッドスペースソフトウェア	A.01.01	G2401AA はアドオンでなく、win.ini ファイルに追加されません。G2401AA は ChemStation でサポートされません。	いいえ。個別に削除する必要があります。

表 9　ChemStation リビジョン A.xx.xx アドオンソリューションのアンインストールの説明 ― 要約

ChemStation A.xx.xx についてのアドオンソリューション	リビジョン	Win.ini のアドオンエントリ（[プログラムの追加と削除] でアンインストールを実行した後、手動での削除が必要なことがあります）	Windows からのプログラムの追加と削除
G2922AA GC の積分されたヘッドスペースソフトウェア	A.01.0x	[PCS, 装置番号] ADDONS=x（x はインストールされているアドオンの数です） ADDONx=C:¥HPCHEM¥HS¥HSAddon.MAC	はい。ただし、アドオンエントリを win.ini から手動で削除する必要があります
CC モード	A.03.02	[PCS, 装置番号] ADDONS=x（x はインストールされているアドオンの数です） ADDONx=C:¥CCMODE¥bin¥ccmode3.mcx [CCMODE3] Path=C:¥CCMODE など [CCMODEIII] version=À.03.xx	はい。ただし、アドオンエントリを win.ini から手動で削除する必要があります
CTC Cycle Composer	1.5.2	[PCS, 装置番号] ADDONS=x（x はインストールされているアドオンの数です） ADDONx=C:¥HPCHEM¥CORE¥PALSEQ.mac	はい。ただし、アドオンエントリを win.ini から手動で削除する必要があります
アーカイブ分割	A.01.00	[PCS, 装置番号] ADDONS=x（x はインストールされているアドオンの数です） ADDONx=C:¥HPCHEM¥CORE¥actsplit.mac	はい、win.ini のすべての関連エントリを完全に削除します

表 9 ChemStation リビジョン A.xx.xx アドオンソリューションのアンインストールの説明 ― 要約

ChemStation A.xx.xx についてのアドオンソリューション	リビジョン	Win.ini のアドオンエントリ（[プログラムの追加と削除] でアンインストールを実行した後、手動での削除が必要なことがあります）	Windows からのプログラムの追加と削除
G1979A マルチシグナル アウトプット アクセサリ	A.01.00	[PCS, 装置番号] ADDONS=x（x はインストールされているアドオンの数です） ADDONx=C:¥HPCHEM¥CORE¥G1979A.mac	はい、win.ini のすべての関連エントリを完全に削除します
Analyst	1.1.1/ 1.4	win.ini 内にアドオンエントリなし	
G2201A CE/MS	A.xx.xx またはそれ以上	[PCS, 装置番号] ADDONS=x（x はインストールされているアドオンの数です） ADDON1=C:¥HPCHEM¥MS¥MSTOP.MAC	はい。ただし、アドオンエントリを win.ini から手動で削除する必要があります

一般的なアドオンソリューション

アドオンソフトウェア製品はすべて、ChemStation リビジョン B.0x.0x 以降から ChemStation リビジョン B.04.0x へのアップグレード前に、アンインストールする必要があります。追加製品 ChemStore および ChemStation Plus セキュリティパックについての自動アップグレードはありません。アドオンソフトウェアは、ChemStation のアップグレード後にアップグレードする必要があります。

ChemStore

ChemStation リビジョン B 上の G2181BA ChemStore ソフトウェアは更新できません。ソフトウェアは、『ChemStore C/S インストールガイド』のアンインストールセクションに従って、アンインストールする必要があります。アンインストールプログラムによって、chemstation.ini ファイル内の関連セクションすべてを削除します。

セキュリティパック

ChemStore アンインストールプログラムによって、セキュリティパック関連の項目すべてを削除します。個別のアンインストールはできません。

LC 固有のアドオンソリューション

すべてのアドオンソフトウェア製品は、どの G2170AA/G2180AA ChemStation から G2170BA/G2180BA ChemStation リビジョン B.04.02 にアップグレードする前にアンインストールする必要があります。アドオンソフトウェアは、ChemStation のアップグレード後にアップグレードする必要があります。

GC 固有のアドオンソリューション

すべてのアドオンソフトウェア製品は、G2070BA ChemStation から ChemStation B.04.02 へアップグレードする前にアンインストールする必要があります。アドオンソフトウェアは、ChemStation のアップグレード後にアップグレードする必要があります。

リテンションタイムロッキング

リテンションタイムロッキング G2080BA ソフトウェアは B.03.01 以降からアドオンではなくなったため、アンインストールする必要はなくなりました。

RTL が B.01.0x ～ B.02.0x にアドオンとしてインストールされている場合は、アップグレードする前に、［コントロールパネル］の［プログラムの追加と削除］を使って削除しておく必要があります。

コンパニオン

コンパニオンはアドオン製品ではなくなったため、アップグレードする前にアンインストールする必要はありません。B.02.01 から、ChemStation コンパニオンは G2070BA GC ChemStation インスタレーションに含まれるようになりました。

ヘッドスペース

ChemStation G2070BA は、G2924AA 統合 HeadSpace ソフトウェアをサポートします。

G2922AA 統合ヘッドスペースソフトウェアは、G2070AA/G2071AA ChemStation でしかサポートされていないため、GC ChemStation リビジョン B.04.02 へアップグレードする前に、コントロールパネルから［プログラムの追加と削除］を使用して削除しておく必要があります。さらに、win.ini ファイル内のヘッドスペースアドオンエントリは手作業で削除する必要があります。

G2922AA の登録番号では G2924AA ソフトウェアは読み込まれないことに注意してください。G2924AA ソフトウェアは、購入する必要があります。

G2401AA A.01.01 ヘッドスペースソフトウェアは、独立したスタンドアロンプログラムであり、G2070BA/G2071BA ChemStation ではサポートしません。

機器の設定

アップグレードプロセスにより設定されている機器が検出され、現在のコンフィグレーションを基に機器が設定されます。アップグレードを使用しかつ、GPIB から LAN 通信への移行を伴わない場合は、特別な追加コンフィグレーションは必要ありません。LAN および GPIB 通信、および通信を変更する場合の機器コンフィグレーションについては、該当する『ChemStation のインストール』マニュアルに記載されています。

GPIB コントロール機器からアップグレードする場合は、アップグレードする前に、必要な LAN 通信コンポーネントをインストールして機器を再設定する必要があります。必要な手順は、該当するクロマトグラフ固有の技術の『ChemStation のインストール』マニュアルに記載されています。

LAN 通信を使用するユーザーまたは GPIB 接続から LAN 接続に移行するユーザーは、ChemStation リビジョン B.04.02 用の通信コンポーネントとして、Agilent BootP サービスを使用する必要があります。現在 CAG BootP Server を使用しているユーザーは、このコンポーネントを削除する必要があります。代わりに Agilent BootP サービスをインストールする必要があります。CAG BootP Server のサポートは終了しました。Agilent BootP サービスプログラムは、ChemStation DVD-ROM にあります。

注記

Agilent 82350 A/B カードは、Windows XP Professional または Windows Vista Business 上で、ChemStation リビジョン B.04.0x でサポートされます。サポートされているすべての分析ハードウェアは、「『37 ページ 図　表 6』」に記載されています。

注記

GPIB 経由で通信する Agilent LC 1100 モジュールまたは 35900E を含むシステムでは、ChemStation リビジョン B.04.0x へアップグレードする前に、LAN 接続にアップグレードする必要があります。

GPIB 通信を使用する Agilent LC 1100 と 35900E は、ChemStation リビジョン B.04.0x 以降ではサポートしません。

4 初めて ChemStation リビジョン B.04.02 を起動する場合

B.04.02 で導入されたスタートアップの変更 67
イージーシーケンス 67
LC ChemStation の新しいユーザーインタフェース 71
B.04.01 で導入されたスタートアップの変更 78
カスタムフィールド 78
B.03.0x と B.02.0x で導入されたスタートアップの変更 85
ナビゲーション項目 85
メソッド & ランコントロールビューを使用した拡張 88
データファイル構造 92
使用可能なメソッド 93
[データ解析] ビューのユーザビリティ強化 94
長いファイル名 100
ファイルの命名規則 102
プレフィックス / カウンタ 104
ChemStation リビジョン A.xx.xx からのデータ読み込み 105
メソッド 106
シーケンス 106
ハイパーシーケンス (LC ChemStation のみ) 107
バッチファイル 107
レポートスタイル 108
UV ライブラリ (LC および CE 3D ChemStation のみ) 108

この章では、グラフィックやデザインのように、旧リビジョンと比較して変更された機能の大部分をカバーしています。新しい機能は、アップグレードパッケージに付属している追加マニュアルで詳しく説明されています（たとえば、新しい積分パラメータについては、『ChemStation の概要』）。リビジョン A システムからのアップデートの他に、16 ビットファイルを 32 ビット ChemStation へアップロードするプロセスについても説明します。

B.04.02 で導入されたスタートアップの変更

イージーシーケンス

［イージーシーケンス］は、シーケンスを、テンプレートを使って短時間で簡単に設定するための、新しいユーザーインタフェースです。テンプレートでは、ユーザーが表示または編集する必要のあるパラメータを指定します。キャリブレーションセットアップは、キャリブレーションタイプとサンプルポジションを指定するための使いやすいドラッグアンドドロップインタフェースを備えています。また、シーケンスの概略機能を表示します。［イージーシーケンス］を使うと、データシステムで分析対象となる複数のシーケンスをシーケンスキューに対して発行できます。

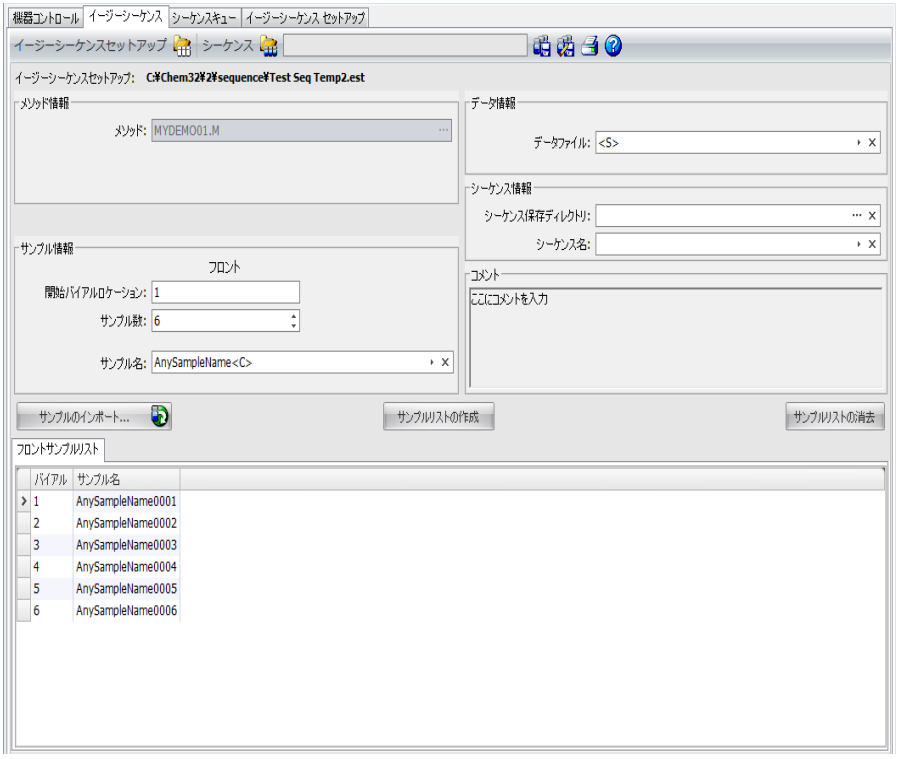


図 2　［イージーシーケンス］タブ

［イージーシーケンス セットアップ］タブ（テンプレート）の使用法

［**イージーシーケンス セットアップ**］は、シーケンス作成の出発点となるテンプレートを作成するために使います。ここには、2 つのパネルがあります。［サンプル］と［キャリブレーション］です。［**サンプル**］パネルでは、メソッド、サンプル、データ、シーケンスについての情報を指定します。テンプレートは、非表示または読み取り専用とするパラメータを指定するためにも使います。［**キャリブレーション**］パネルは、キャリブレーション分析の設定と表示を行うためのグラフィカルインタフェースを備えています。［キャリブレーション］は、キャリブレーションタイプ、周期的シーケンスとブラケットシーケンス、サンプルポジションを指定するための使いやすいドラッグアンドドロップインタフェースを備えています。

イージーシーケンス テンプレートの作成方法

1 ［**イージーシーケンス セットアップ**］タブから［**サンプル**］パネルを選択します。既存のテンプレートを開くか、新しいテンプレートを作成します。

2 ［**メソッド**］を選択します。メソッドの注入ソースが［デュアル］の場合は、［デュアル インジェクション］オプションが表示されます。バックシグナルに対しては、バック用の解析メソッドを指定できます。メソッドはテンプレートで唯一必須のパラメータです。

3 ［**バイアル開始ロケーション**］、［**サンプル数**］、［**サンプル名**］を指定します。

4 ［**データロケーション**］を選択します。

5 ［**シーケンスロケーション**］を選択し、［**シーケンス名**］を指定します。

6 テンプレートにコメントを記入します。

7 非表示または読み取り専用とするパラメータを指定します。［**注入回数 / バイアル**］、［**サンプルアマウント**］、［ISTD アマウント］、［**注入量**］などに、デフォルト値を入力します。［**イージーシーケンス**］タブでシーケンスを作成するときに、間違える可能性を最小限にできます。

8 テンプレートを保存します。

キャリブレーションを定義するには、以下の手順を実行します。

テンプレート内で使用するメソッドは、必要なレベルにキャリブレーションされている必要があります。

1 ［**イージーシーケンス セットアップ**］タブから［**キャリブレーション**］パネルを選択します。
2 ［**キャリブレーションモード**］ドロップダウンリストから［**周期的**］または［ **ブラケット** ］を選択します。
3 ［ **シーケンスダイアグラム** ］には、以下のセクションがあります。
   - **シーケンス開始**
   - **周期的 / ブラケット**
   - **サンプル**
   - **シーケンス終了**
4 Sequence の **サンプル** エリアでは、サンプル数または注入回数に基づいて **キャリブレーションインターバル** を設定します。
5 **サンプルタイプ** エリアから Sequence Diagram セクションまでアイコンをドラッグすることにより、Sample type、**ブランク**、**キャリブラント**、または **QC サンプル** を設定します。
6 各サンプルタイプのパラメータを設定し、**非表示**または**読み込み専用**を指定します。
7 ［ **イージーシーケンス** ］の概要で、周期的 / ブラケットキャリブレーションを確認します。
8 テンプレートを保存します。

［ イージーシーケンス ］ タブ（ シーケンス ）の使用法

［ **イージーシーケンス セットアップ** ］で作成したテンプレートからシーケンスを作成するには、［ **イージーシーケンス** ］ タブを使います。CSV 形式で保存したサンプルのインポートも可能です。

シーケンスの定義方法

1 ［**イージーシーケンス**］タブで［イージーシーケンスセットアップ開始］アイコンをクリックし、テンプレートを開きます。

2 必要に応じて、更新します。ここには、サンプルバイアルロケーション、キャリブレーション化合物バイアルロケーション、データ、シーケンスロケーションが含まれています。編集可能なパラメータは、テンプレートのコンフィグレーションに依存します。

3 記入済みのサンプルが新しいサンプルロケーションに適合しない場合は、[**サンプル記入**] をクリックしてテーブルを修正します。

4 [**シーケンスのプレビュー / 印刷** ...] をクリックしてシーケンスをプレビューします。

5 シーケンスを保存します。

チップ

シーケンスは、キュー内でのステータスが **保留中** であれば、編集可能です。

6 [**保存してキューに追加**] をクリックし、シーケンスをシーケンスキューに登録します。

サンプルデータのインポート方法

[**イージーシーケンス**] には、サンプルデータセットをインポートできます。サンプルをインポートする前に、CSV ファイルを準備して正しくフォーマットしておく必要があります。CSV サンプルデータファイルの作成方法については、オンラインヘルプを参照してください。

1 [**イージーシーケンス**] タブで [**イージーシーケンスセットアップ開始**] ボタンをクリックし、テンプレートを開きます。

2 [**サンプルのインポート** ...] をクリックします。

3 インポートする CSV ファイルを選択します。

有効なフィールドがすべてインポートされます。

注記

サンプルデータを [**バックサンプルリスト**] にインポートする場合は、[**サンプルのインポート**] ボタンを押す前に、[**バックサンプルリスト**] を選択して表示させていることを確認してください。

4 [サンプルリスト] をレビューし、各フィールドを確認します。

［シーケンスキュー］タブ（キュー）の使用法

キューには、複数の異なるシーケンスを追加できます。データシステムがレディになると、最初にキューに登録されたシーケンスが起動されます。追加シーケンスはキューの最後に登録されます。またシーケンスの実行順序は、変更できます。キュー内の［**イージーシーケンス**］は、ステータスが保留中であれば編集可能です。

詳細については、オンラインヘルプシステムを参照してください。［**イージーシーケンス セットアップ**］のチュートリアルは、オンラインヘルプに用意されています。

LC ChemStation の新しいユーザーインタフェース

ChemStation B.04.02 では、LC ChemStation 用の新しいユーザーインタフェースが導入されました。

新しいユーザーインタフェースの機能は、以下のとおりです。

- デスクトップスペースを有効に利用するため、機器コントロールパネルのサイズを自由に変更する機能
- 重要な情報だけを表示するための表示 / 非表示機能
- 同一種類の複数のデバイス（例えば、2 つのポンプ）のグラフィック表示
- すべてのバルブのグラフィック表示
- 各モジュールのメソッドパラメータとすべての重要な機能への直接アクセス
- 個々のモジュールのステータス表示とそれに伴う機器全体のステータス表示
- 特定の機能について重要情報を表示するツールチップ
- 現在の分析またはシーケンスラインのサンプル情報の表形式表示
- データ解析パラメータへの直接アクセス

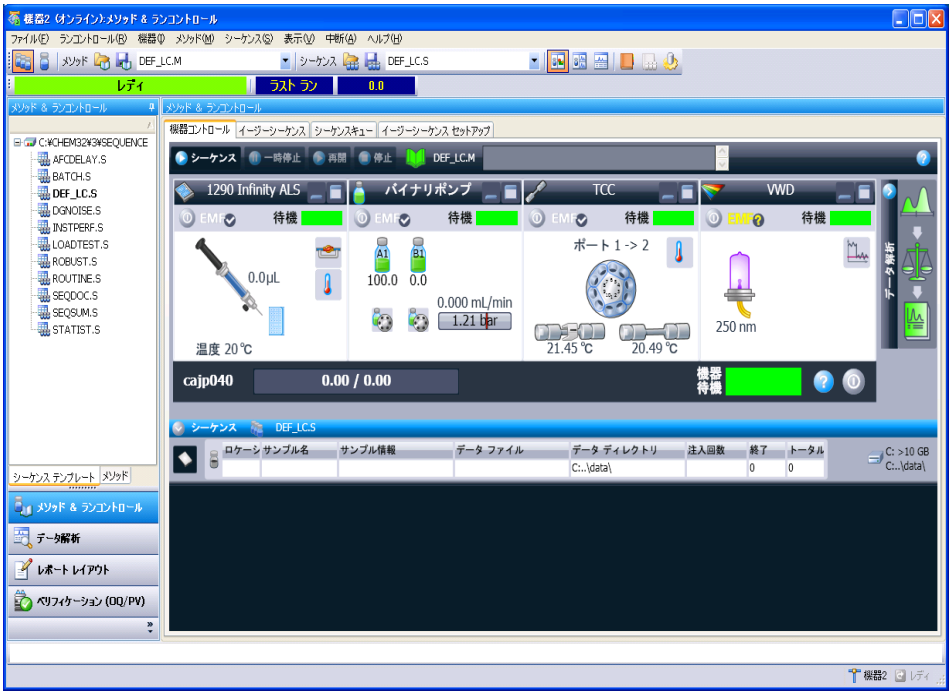


図 3 RC.NET ドライバを備えた［メソッド & ランコントロール］ビュー

LC 用の新しいユーザーインタフェース (UI) の使用可否は、1100/1200 モジュール用の機器ドライバに依存します。ChemStation B.04.02 では、新しいドライバセットである Rapid Control.NET ドライバが導入されました。新しい UI が使用できるのは、このドライバセットが使われる場合だけです。クラシックドライバを使っている場合は、UI は従来と同じです。RC.NET ドライバの使用可能性については、表 『73 ページ 図 表 10』～『76 ページ 図 表 14』を参照してください。

大部分の 1100/1200 モジュールでクラシックドライバと RC.NET ドライバの両方が用意されています。しかし、これらのドライバタイプのうち 1 つしかサポートしていないモジュールも、少数ですが存在します。1 つの ChemStation 機器では、クラシックドライバと RC.NET ドライバのいずれか 1 つしか使えません。

表 10　Agilent 検出器を使用できるドライバ

モジュール / デバイス	製品番号	クラシックドライバ	RC.net ドライバ
Agilent 1100 VWD	G1314A	Y	Y
Agilent 1200 VWD	G1314B/D	Y	Y
Agilent 1200 VWD SL	G1314C	Y	Y
Agilent 1200 VWD SL Plus	G1314E	Y	Y
Agilent 1100/1200 DAD	G1315A/B	Y	Y
Agilent 1100/1200 DAD SL	G1315C	Y	Y
Agilent 1200 DAD	G1315D	Y	Y
Agilent 1290 Infinity DAD	G4211A	N	Y
Agilent 1100/1200 FLD	G1321A	Y	Y
Agilent 1100/1200 RID	G1362A	Y	Y
Agilent 1100 MWD	G1365A	Y	Y
Agilent 1100/1200 MWD	G1365B	Y	Y
Agilent 1100/1200 MWD SL	G1365C	Y	Y
Agilent 1200 MWD	G1365D	Y	Y
Agilent 1100/1200 UIB	G1390A	Y	Y
Agilent ELSD	G4218A	Y	N

表 11　Agilent サンプリングシステムを使用できるドライバ

モジュール / デバイス	製品番号	クラシックドライバ	RC.net ドライバ
Agilent 1100 オートサンプラ	G1313A	Y	Y
Agilent 1100/1200 オートサンプラ（温度調節機能付き）	G1327A および G1329A/B	Y	Y
Agilent 1100/1200 ウェルプレートオートサンプラ（温度調節機能付き）	G1367A および G1368A	Y	Y
Agilent 1200 高性能オートサンプラ (SL)	G1367B/C	Y	Y
Agilent 1200 高性能オートサンプラ SL Plus	G1367D	Y	Y
Agilent 1100/1200 マイクロウェルプレートオートサンプラ（温度調節機能付き）	G1377A および G1378A	Y	N
Agilent 1100 マイクロオートサンプラ	G1389A	Y	N
Agilent 1200 ウェルプレートハンドラ	G2257A	Y	N
Agilent 1200 デュアルループオートサンプラ	G2258A	Y	N
Agilent 1100/1200 分取オートサンプラ（温度調節機能付き）	G2260A および G2261A	Y	N
Agilent 1290 高性能オートサンプラ	G4226A	N	Y
CTC HTC PAL オートサンプラ	G4270	Y	N
CTC HTS PAL オートサンプラ	G4271	Y	N

表 12 Agilent ポンプを使用できるドライバ

モジュール / デバイス	製品番号	クラシックドライバ	RC.net ドライバ
Agilent 1100/1200 アイソクラティックポンプ	G1310A	はい	はい
Agilent 1100/1200 クォータナリポンプ	G1311A	はい	はい
Agilent 1100/1200 バイナリポンプ	G1312A	はい	はい
Agilent 1200 バイナリポンプ SL	G1312B	はい	はい
Agilent 1200 分取ポンプ	G1361A	はい	いいえ
Agilent 1100/1200 キャピラリポンプ	G1376A	はい	いいえ
Agilent 1100/1200 ナノポンプ	G2225A および G2226A	はい	いいえ
Agilent 1290 Infinity 高性能バイナリポンプ	G4220A	いいえ	はい

表 13 その他の Agilent モジュールを使用できるドライバ

モジュール / デバイス	製品番号	クラシックドライバ	RC.net ドライバ
Agilent 1100 フラクションコレクタ	G1364A	Y	N
Agilent 1100/1200 分取フラクションコレクタ	G1364B	Y	N
Agilent 1100/1200 分析フラクションコレクタ	G1364C	Y	N
Agilent 1100/1200 マイクロフラクションコレクタ	G1364D	Y	N
Agilent 1100/1200 カラムコンパートメント	G1316A	Y	Y
Agilent 1200 カラムコンパートメント SL	G1316B	Y	Y

表 13 その他の Agilent モジュールを使用できるドライバ

モジュール / デバイス	製品番号	クラシック ドライバ	RC.net ドライバ
Agilent 1290 Infinity カラムコンパートメント	G1316C	Y[1]	Y
1100 チップキューブインタフェース	G1390A	Y	N
Agilent 1200 SFC Fusion S5	G4301A	N	Y[1]

[1] 新しい 2/10 および 2/6 バルブやメソッド開発ソリューションのサポートはしていません

表 14 Agilent バルブを使用できるドライバ

モジュール / デバイス	製品番号	クラシック ドライバ	RC.net ドライバ
9 ポジション /7 ポートバルブ	G1156A	Y	Y
2 ポジション /10 ポートバルブ	G1157A	Y	Y
2 ポジション /6 ポートバルブ (SL)	G1158A/B	Y	Y
6 ポジション切り替えバルブ	G1159A	Y	Y
12 ポジション /13 ポート切り替えバルブ	G1160A	Y	Y
2 ポジション /6 ポートマイクロバルブ	G1362A	Y	Y
2 ポジション /10 ポートマイクロバルブ	G1363A	Y	Y
バルブキット	G4230A/B	N	Y
Agilent 1290 Infinity Flexible Cube	G4227A	N	Y

ChemStation B.04.02 には、現在の LC 機器コンフィグレーション用のドライバセットの選択を支援する［**コンフィグレーションアシスタント**］が用意されています。［**LC システムのコンフィグレーションに、コンフィグレーション アシスタントを使用**］オプションを選択しておくと、［セットアップウィザード］の終了時に［**コンフィグレーション アシスタント**］

が自動的に起動されます。[コンフィグレーションアシスタント] についての詳細は、『LC および CE システム用の ChemStation インストールマニュアル』を参照してください。

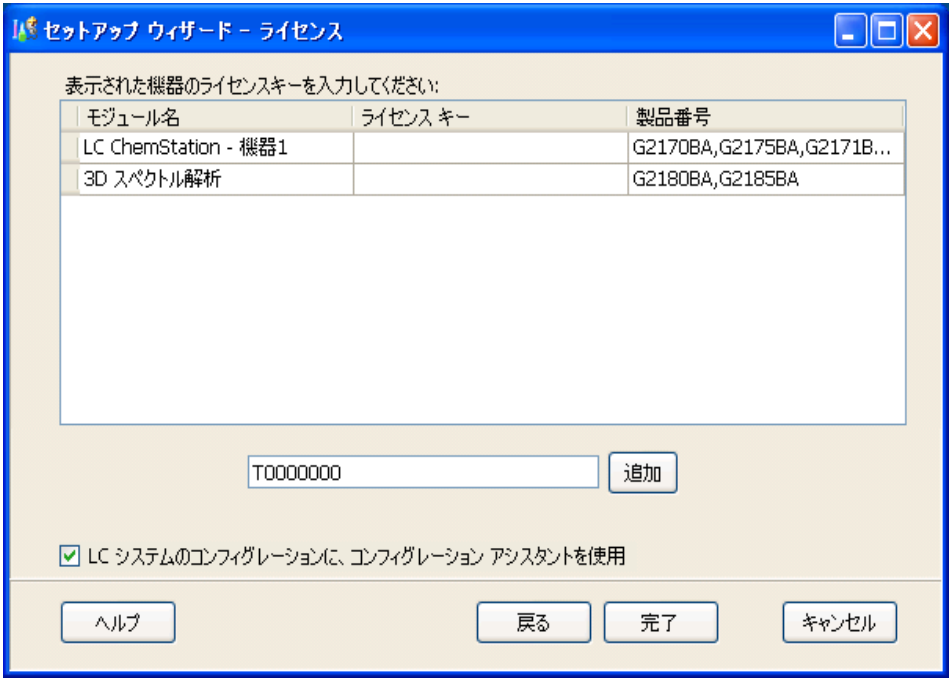


図 4 セットアップウィザードのオプション [コンフィグレーションアシスタントを使用] を選択

LC ChemStation 用の RC.NET ドライバを使うと、ChemStation メソッドの内部構造も変化します。これが既存のメソッドにどのような影響を及ぼすかについての詳細は、『「アップグレードが LC メソッドへ与える影響」159 ページ 図』を参照してください。『「カスタマイズされたソリューションへの影響」113 ページ 図』ではマクロでカスタマイズしたソリューションに与える影響について記載されています。

B.04.01 で導入されたスタートアップの変更

リビジョン B.02.01 で導入されたデータ構成スキームは、以下の新機能で強化されました。

- ［データ解析］ビューの重ね書き機能強化
- 既存のシーケンスコンテナへのデータ取り込み（［ユニークなフォルダ作成］オン）
- データファイルへのマニュアル積分イベントの保存
- データ解析を扱うシーケンスとメソッドのユーザビリティ強化 詳細は、『新しい ChemStation ワークフローから始める』マニュアルを参照してください。

詳細は、『新しい ChemStation ワークフローから始める』マニュアルを参照してください。

カスタムフィールド

ChemStation は、シーケンス、固有サンプル、予想される化合物に関する情報を入力できる多数のフィールドを用意しています。これらのフィールドは、多くの標準分析タスクに対して十分です。しかし、一部の固有タスクに対してはサンプルや化合物に関する追加情報を保存する必要があるかもしれません。この場合、いわゆるカスタムフィールドを定義できます。

カスタムフィールドはサンプル情報や化合物情報に関して使用できます。カスタムフィールドの定義は、メソッド定義の一部として保存されます。カスタムフィールドを定義する場合、ニーズに従って、追加情報に関して適切なフィールド名とデータタイプを定義できます。

一旦、カスタムフィールドを定義すると、現在のシーケンスのシーケンステーブルに実測値を入力できます。これらの値は ChemStation レポートに表示されます。

カスタムフィールドの設定

カスタムフィールドの定義はメソッドの一部です。サンプルに関連する最高 10 個のカスタムフィールドと化合物に関連する最高 10 個のカスタムフィールドを定義できます。また、他の既存のメソッドからカスタムフィールド定義をインポートできます。

新しいカスタムフィールドを定義するには：

1 [**メソッド & ランコントロール**] ビューを選択します。

2 必要なメソッドを読み込みます。

3 [**メソッド**] > [**カスタムフィールドの設定**] を選択します。

[**カスタムフィールド定義の設定**] ダイアログが開きます。これには 2 つのセクションがあり、1 つはサンプルカスタムフィールド用で、もう 1 つは化合物カスタムフィールド用です。

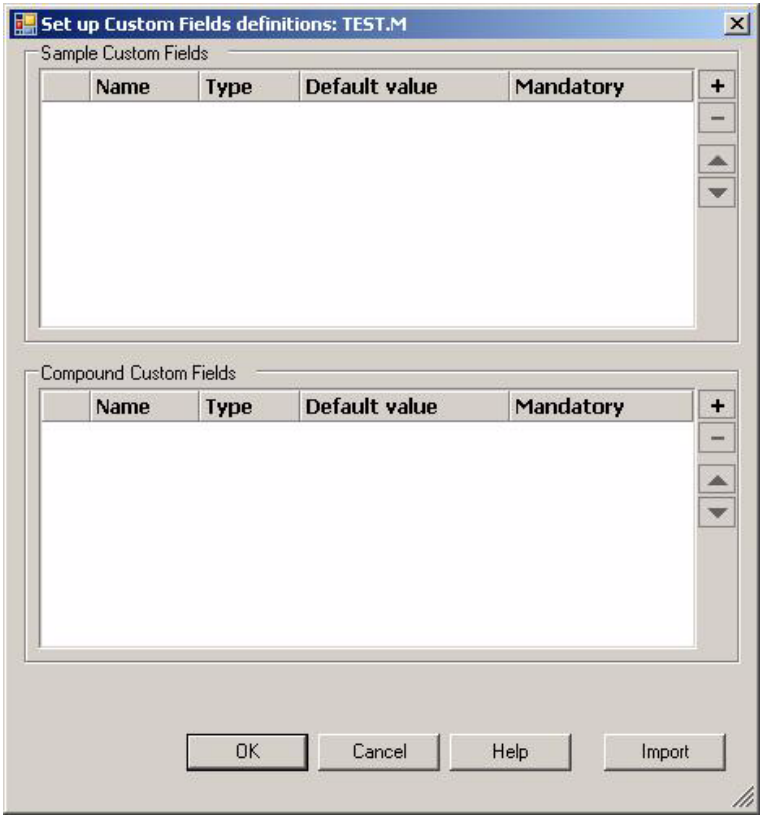


図 5 ［カスタムフィールド定義の設定］ダイアログ

4 + をクリックして、新しいカスタムフィールドを追加します。

5 新しいカスタムフィールドに適した名前を入力します（たとえば、Color）。

6 適したデータタイプを選択します（たとえば、TEXT）。

7 該当する場合、デフォルト値を入力します（たとえば、Blue）。

8 該当する場合、［**必須**］チェックボックスを選択し、カスタムフィールドが常に入力されるようにします。

注記 ［必須］フィールドでは、デフォルト値も追加した方がいいかもしれません。

9 必要な場合、- をクリックして選択したカスタムフィールドを削除します。

10 必要な場合、↑ と ↓ ボタンを用いてカスタムフィールドの順序を調整します。

既存のメソッドからカスタムフィールドをインポートするには：

1 カスタムフィールドを用いたメソッドがローカルのファイルシステムで使用できるか確認します。

2 対象メソッド（カスタムフィールド定義をインポートするメソッド）を読み込みます。

3 [メソッド] > [カスタムフィールドの設定] を選択します。

4 [インポート] をクリックします。ローカルファイルシステムからソースメソッドを選択できる場合、ダイアログが開きます。

5 [OK] をクリックします。

カスタムフィールド値の指定

定義済みカスタムフィールドの指定値は実際のシーケンスにより異なります。そのため、値はシーケンステーブルで指定されます。

サンプルカスタムフィールド値を入力するには：

1 [メソッド & ランコントロール] ビューで、必要なシーケンスを読み込みます。

2 [シーケンス] > > [シーケンステーブル] を選択し、シーケンステーブルを開きます。

3 [カスタムフィールド] をクリックします。

[カスタムフィールド値の設定] ダイアログが開きます。[サンプルカスタムフィールド] タブは有効です。各定義済みカスタムフィールドは個別の列に表示されます。必須カスタムフィールドは、フィールド名の前に (*) で印が付けられます。

この行はシーケンステーブルの行に対応します。

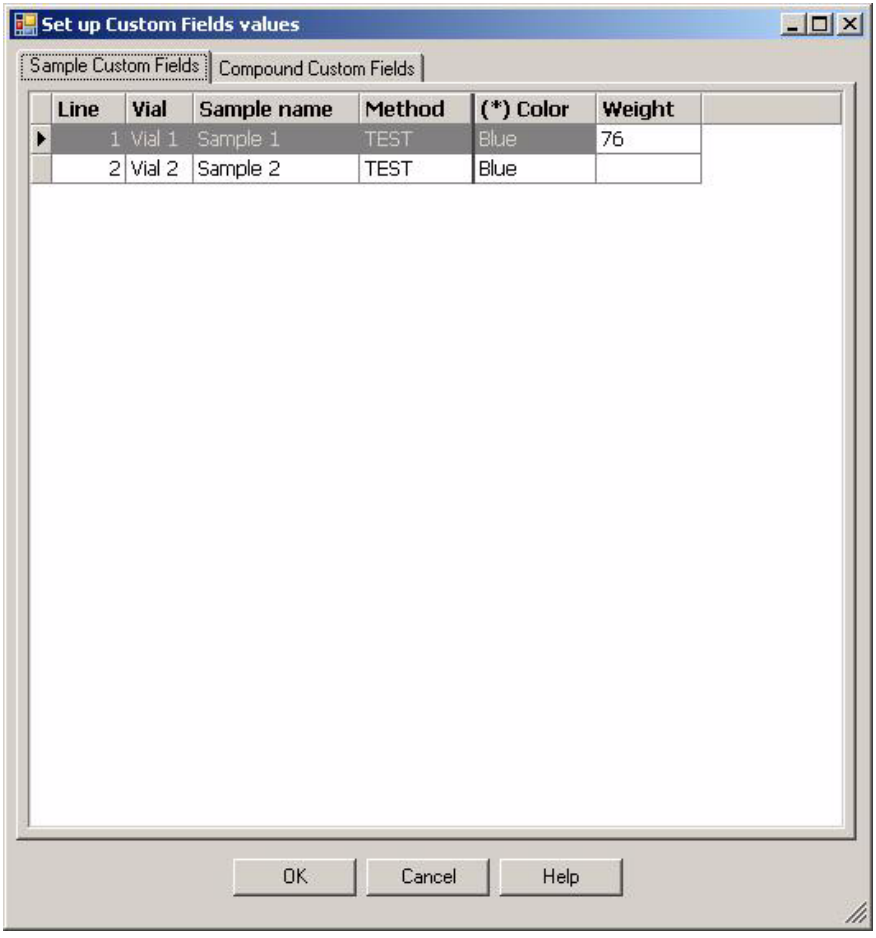


図 6 カスタムフィールド値の設定 – サンプルカスタムフィールド

4 各サンプルおよびカスタムフィールドに必要な値を入力します。

注記 必須フィールドの入力が完了しない限り、シーケンスを起動できません。

化合物カスタムフィールド値を入力するには：

1 ［化合物カスタムフィールド］タブを選択します。

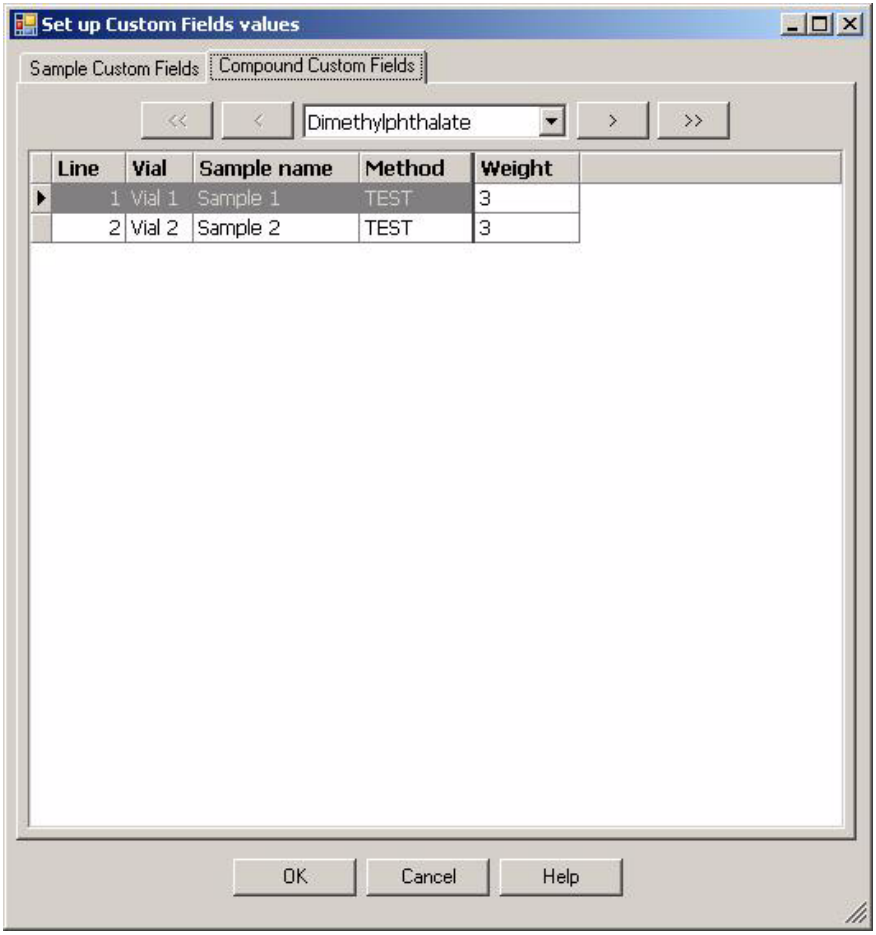


図 7　　カスタムフィールド値の設定 – 化合物カスタムフィールド

2 一番上のドロップダウンリストから必要な化合物を選択するか、または <<、<、> または >> をクリックし、必要な化合物に移動します。

3 各サンプルおよびカスタムフィールドに必要な値を入力します。

4 他の化合物を選択し、それに応じた値を入力します。

5 [OK] をクリックします。

カスタムフィールドのレポート作成

カスタムフィールド値は、ChemStation レポートに自動的に表示されません。ChemStation レポートにカスタムフィールドを表示する場合、まずレポートオプションを調整する必要があります。

ChemStation レポートにカスタムフィールドを表示するには：

1 [**データ解析**] ビューを選択します。

2 [**レポート**] > [**レポート条件**] を選択します。

3 チェックボックス [**サンプル情報にサンプルカスタムフィールドを追加**] と [**化合物カスタムフィールドを追加**] を選択します。

4 [OK] をクリックします。

これで、カスタムフィールドとそれに従った値が ChemStation レポートに表示されます。

再解析

再解析中にカスタムフィールドの値を変更することができます。『「カスタムフィールド値の指定」81 ページ 図』セクションに記載されたものと同じ方法での再解析の準備で、[データ解析] ビューで [シーケンス] テーブルを編集する場合、カスタムフィールド値を使用できます。

取り込み後、サンプルのカスタムフィールドの値のみを変更できます。再解析に使用されるメソッドに、取り込みに使用されるものとして異なるカスタムフィールドが含まれる場合にでも、サンプルに新しいカスタムフィールドを付けることはできません。

[**ユニークなフォルダ作成**] がオフの場合のみ、サンプルに添付されるカスタムフィールドを変更することができます。[**ランタイムチェックリストに従う**] または [**取り込みのみ**] が、実行するメソッドの一部として選択されます。異なるカスタムフィールドでメソッドを追加した後、[**再解析のみ**] に切り替え、再解析されたサンプルに新しいフィールドを添付します。

B.03.0x と B.02.0x で導入されたスタートアップの変更

B.02.01 から ChemStation は、柔軟性の高い新しいデータ管理と一緒に、新しい設計およびツリーベースのナビゲーションを提供するようになりました。ナビゲーション項目で、マウスの右クリック機能を使用することで、データファイルの読み込みなどのデータの取り扱いを簡単に行うことができます。グラフィックユーザーインタフェース項目はより柔軟な操作が行えるよう改善 / 再編成されています。ツリーベースのナビゲーションの使用が可能になりました。グラフィックアクション項目（アイコン）の機能、およびこれらの項目の ChemStation ビューロケーションは変更されていません。これらのグラフィックの変更をサポートするには、サポートされている画面解像度が 1280 x 1024 であることに注意してください。

ナビゲーション項目

ChemStation のすべてのビューの左側には、ツリーベースのナビゲーションパネルがあります。この**ナビゲーションパネル**には自動非表示機能があり、ナビゲーションボタン領域のサイズ変更や再並び替えなどの標準機能があります。ナビゲーションペインには、次の 2 つの項目が含まれます。

ナビゲーションボタン

ナビゲーションボタンによって、ChemStation ビューは特定のナビゲーションボタンをクリックすると切り替えることができます。ナビゲーションボタンセクションは最小化、拡張、または再並び替えができます。

ChemStation エクスプローラ

ChemStation エクスプローラの内容は、ビューによって異なります。ChemStation エクスプローラでは、[**メソッド & ランコントロール**]、[**データ解析**] および [**レポートレイアウト**] などの別の素子に移動することができます。デフォルトでは、これらの要素はコンフィグレーションエディタ設定に基づいています。そのため、以前の ChemStation リビジョンのように、メソッドとシーケンスは chem32 と chem32 フォルダに置かれます（n は装置番号を示します）。ここで、このパスは拡張でき、メソッド、

シーケンス、データロケーションの新しいノードは、ビューメニューに新たに導入された［**プレファレンス**］オプションを使用して指定できます。これらのパスには、データ取込に使用されるマスターメソッドおよびシーケンス テンプレートが含まれます。

表 15　ナビゲーションペイン項目

ナビゲーションボタン	ChemStation エクスプローラ要素
メソッド & ランコントロール	シーケンス テンプレート (*.s)/ マスターメソッド (*.m)
データ解析	データ (*.d)/ マスターメソッド (*.m)
レポートレイアウト	マスターメソッド
ベリフィケーション (LC および LC/MS)	ベリフィケーションビューショートカット
診断 (LC および LC/MS)	診断ビューショートカット
チューン (LC/MS)	チューンビュー固有ショートカット

ChemStation エクスプローラのメソッドおよびデータファイルなどは、マウスの右クリックまたはダブルクリックを使用して読み込むことができます。変更は、一般に ChemStation グラフィックインターフェイスに直接反映されます。さらに、特定ビュー項目についてのオンラインヘルプは、マウスの右クリックで呼び出すことができます。

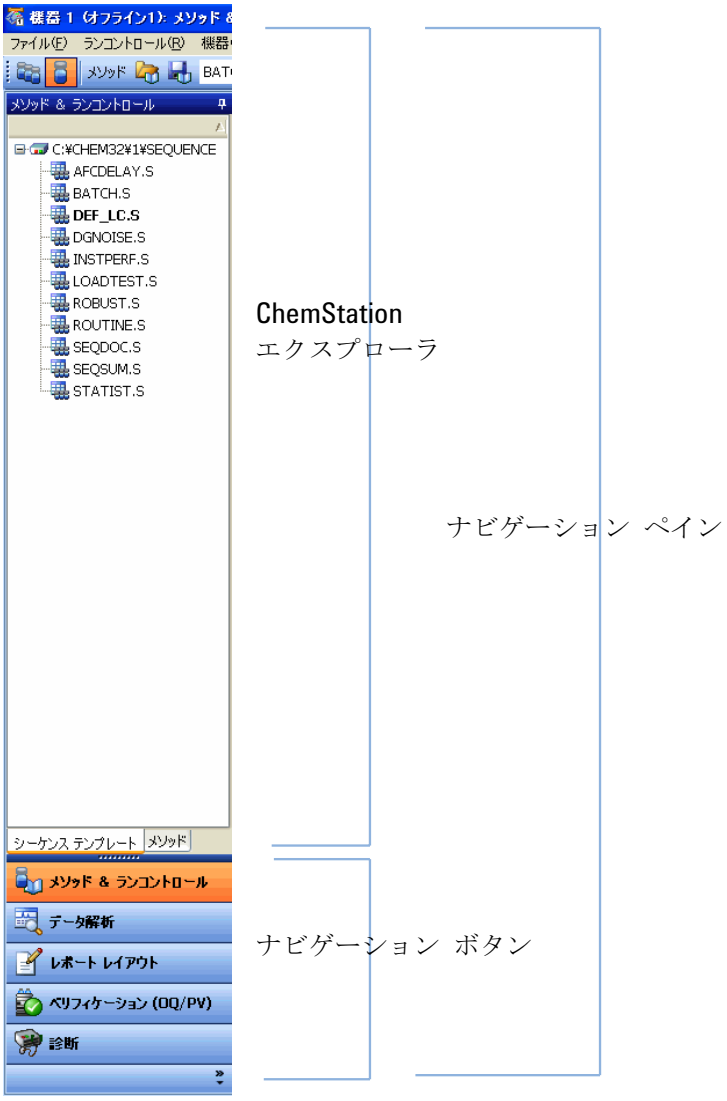


図 8 ChemStation エクスプローラとナビゲーションボタンを表示するナビゲーションペイン

メソッド & ランコントロールビューを使用した拡張

メソッド & ランコントロールビュー用の ChemStation エクスプローラによって、メソッドおよびシーケンスのテンプレートを直接読み込むことができます。［ビュー］メニューに新しく導入された［プレファレンス］オプションによって、ChemStation エクスプローラに含まれる追加のパスをセットアップすることができます。［プレファレンス］オプションによって、データ保存などの新たな柔軟性が提供されます。

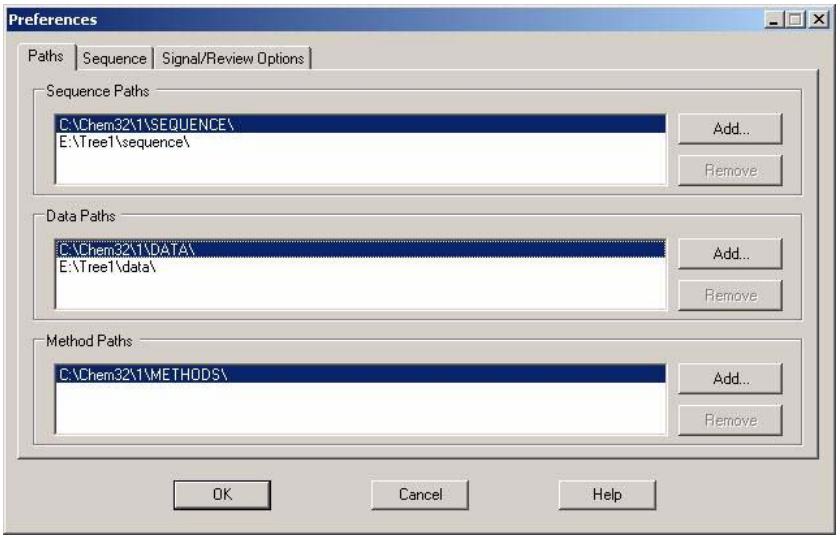


図 9 ChemStation エクスプローラのパス環境設定

サンプル情報

サンプル情報ダイアログでは、データ保管で使用できるパスを選択できます。追加のデータパスは、［**ビュー**］メニューから［**プレファレンス**］ダイアログボックスを使用して指定できます。データパスを追加した後、**サンプル情報**ダイアログボックスのパス項目にあるドロップダウンメニューを使用して、新しいパスを選択できます。データファイルのロケーションは、今後は ChemStation の chem32/n/data フォルダ（またはコンフィグレーションエディタでのユーザー定義設定）には制限されません。

シーケンスパラメータ

シーケンスパラメータダイアログでは、データ保管で使用できるパスを選択できます。追加のデータパスは、[**ビュー**] メニューから [**プレファレンス**] ダイアログボックスを使用して指定できます。データパスを追加した後、**シーケンスパラメータ**ダイアログボックスのパス項目にあるドロップダウンメニューを使用して、新しいパスを選択できます。データファイルのロケーションは、今後は ChemStation の chem32/n/data フォルダ（またはコンフィグレーションエディタでのユーザー定義設定）には制限されません。

シーケンステーブル

シーケンステーブルのセットアップについては、使用できるメソッドをブラウザを使用して閲覧できる機能が搭載されています。メソッドのロケーションは、今後は ChemStation の chem32/n/method フォルダ（またはコンフィグレーションエディタでのユーザー定義設定）には制限されません。ChemStation エクスプローラで使用できるメソッドは「マスター」メソッドで、シーケンステーブル内のメソッドフィールドは、最後に使用する「マスター」メソッドフォルダにリンクされています。メソッド開発が完了した後は、通常マスターメソッドが変更されることはありません。

シーケンステーブルとシーケンスパラメータ、およびその他のシーケンス関連のパラメータは、sequence.s ファイルに保存されます。シーケンス（*.s ファイル）は、デフォルトでは chem32/n/sequences に置かれます。[**プレファレンス**] を使用すると、その他のロケーションにシーケンス *.s テンプレートを保存することができます。これらのシーケンスはシーケンス テンプレートとして扱われ、再分析には使用できますが、シーケンスの再処理には使用できません。

プレファレンスを用いたシーケンスデータの取り込み

シーケンスを実行すると、読み込んだ sequence_name.s テンプレートが取得されて実行されます。システムによって、定義済みのシーケンスラインに従って、スケジュールされたランが実行されます。ChemStation リビジョン B.02.01 から、sequence_name.s ファイルをシーケンス テンプレートとして使用し、ChemStation 環境設定プレファレンスと一緒に新たな柔軟性が提供されます。

シーケンスデータは、定義済みのシーケンスコンテナ名を使用して、シーケンスデータコンテナに格納されています。[**プレファレンス**] ダイアログボックスの [**シーケンス**] タブで、これらのシーケンスコンテナの命名規則（名前パターン）を指定することができます。[**シーケンス**] タブはデータ取得のみに使用するので、オンラインシステムにのみ存在します。

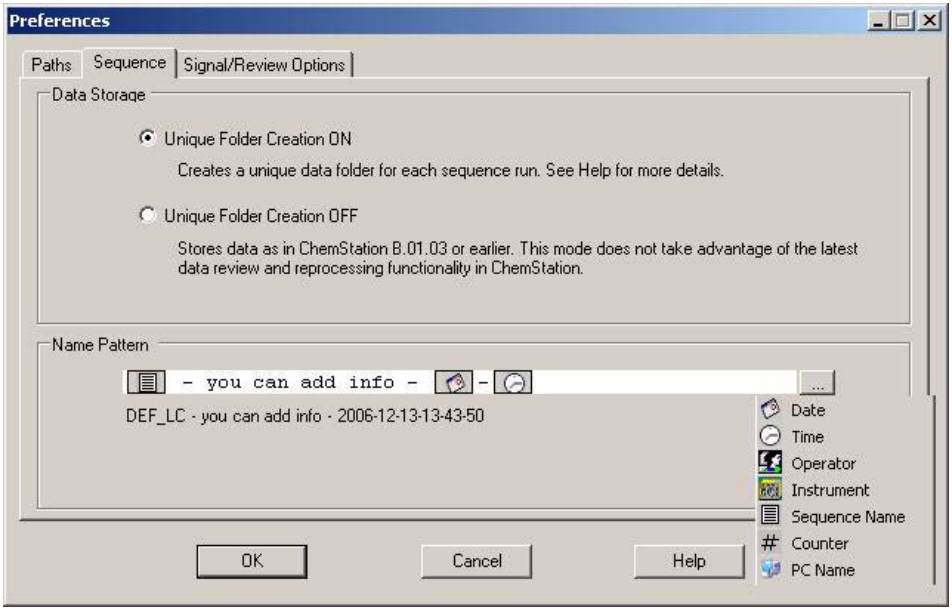


図 10　　シーケンスの名前付けについてのプレファレンス

シーケンス名パターンには、様々なセクションを含めることができます。デフォルトのシーケンス名パターンは次のようになります。

- シーケンス名 時間 日付

選択されたセクションによって、システムはシーケンスデータコンテナの名前パターンを作成します。この特定のシーケンスに属するデータファイル、メソッド、シーケンスログブック、sequence_name.s ファイル、および sequence_name.b ファイルはすべて、シーケンスデータコンテナに保存されます。新しいシーケンスデータコンテナは、シーケンスが開始されるたびに作成されます。

現在はシーケンス（.S）ファイルをシーケンス テンプレートとして使用するため、この新しいコンセプトによって、既存のデータを上書きしたりシーケンスパラメータを変更したりせずに、sequences.s ファイルを何度

も実行することができます。カウンタと時間のどちらもシーケンス名パターンで使用されていない場合は、システムはカウンタを自動的に導入して、データが上書きされないようにします。同じシーケンス テンプレートを使用する 2 つ目、3 つ目およびそれ以降のシーケンスでは、シーケンスコンテナ名にカウンタが追加されます。シーケンスデータコンテナコンセプトのために、ChemStation リビジョン B.02.01 以降で作成されたシーケンスデータの再解析は、[データ解析] ビューで実行する必要があります。リビジョン B.01.03 までの ChemStation で取り込まれたシーケンスデータ、または B.03.01 で **[ユニークなフォルダ作成]** がオフになっている場合は、**[メソッド&ランコントロール]** ビューで再解析する必要があります。

注記

ChemStation B.02.01 以降は、[データ解析] タスクは、オフラインの機器セッションで実行する必要があります。データ取込中に、オンラインシステムの **[データ解析]** ビューに切り替えることはできなくなります。したがって、snapshot.d ファイルはシステムのオフラインセッションでレビューする必要があることに注意してください。[プログラムグループ] 項目を使用してオフラインの ChemStation セッションを開き、**[ビュー / 再解析コピー]** を使用して ChemStation 内から再解析コピーを開始します。

リキャリブレーションを行うシーケンスデータの取り込み

シーケンス内でリキャリブレーションを実行するには、キャリブレーション済みのメソッドを選択して、サンプルタイプ**「キャリブレーション」**を選択し、シーケンステーブルでリキャリブレーションオプションを指定します。

シーケンスをリキャリブレーションすると、システムにより定義済みのシーケンス名パターンに基づいたシーケンスデータコンテナを作成します。シーケンス関連のメソッドはすべて、シーケンスデータコンテナにコピーされ、取り込んだデータファイルが保存されます。シーケンスは 1 行ずつ実行され、個別のデータファイルの量を計算するのに使用する更新済みのキャリブレーションテーブルは、そのデータファイルについてのデータ解析メソッド (DA.M) に保存されます。シーケンスが完了すると、更新済みのキャリブレーションテーブルはシーケンスメソッドに保存されます。データ取込に、アップデータされたシーケンスコンテナメソッドを使用する場合は、このメソッドをシーケンスデータコンテナから定義済みのメソッドパスにコピーする必要があります。新しいメソッドまたは更新されたメソッドは、ChemStation エクスプローラのメソッドビューでマスターメソッドとして利用可能になります。

データファイル構造

ChemStation B.02.01 では、取込んだシーケンスデータについて新しいデータ保管コンセプトが導入されました。実行済みのシーケンスファイル (*.S) に属する項目はすべて、ユニークな名前を使用したシーケンスデータコンテナに保存されます。

- シーケンスデータファイル (*.D)
  - 個別のデータファイルについての取り込みメソッド ACQ.M
  - 個別のデータファイルについてのデータ解析メソッド DA.M データファイルと共に保存される 2 つの個別のメソッドは、使用したメソッドのコピーであり、データ取り込み時と全く同じパラメータが含まれています。
- シーケンス中に使用されたすべてのメソッドファイル (*.M)
- 元のシーケンステンプレートファイル (*.S)
- シーケンス関連バッチファイル (*.B)
- シーケンス関連ログブック (sequence_name.log) ファイル

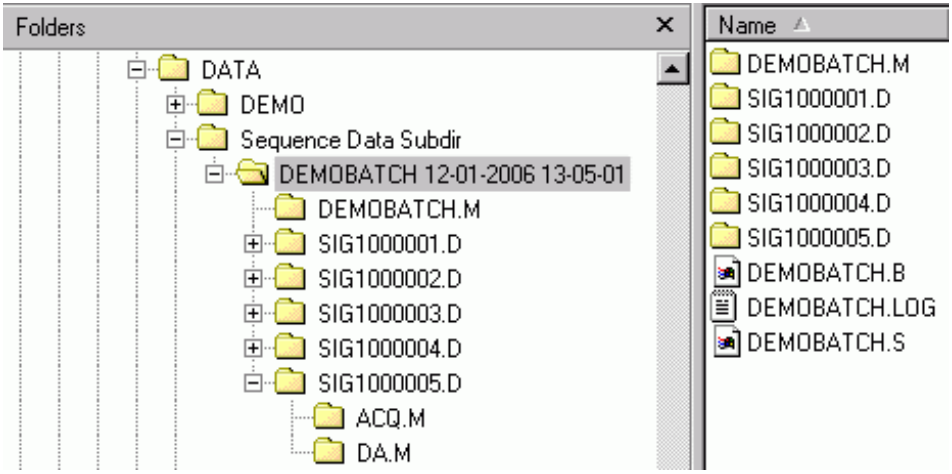


図 11 シーケンスデータコンテナ内容

シーケンスデータコンテナファイルは、[**データ解析**] でのレビューおよび再解析で使用われます。このとき、マスターメソッドまたはマスターシーケンステンプレートの変更は不要です。

B.04.01 では、このスキームが、以下の新機能によって強化されました。

- [**データ解析**] ビューの重ね書き機能強化
- 既存のシーケンスコンテナへのデータ取り込み（[**ユニークなフォルダ作成**] オン）
- データファイルへのマニュアル積分イベントの保存
- データ解析を扱うシーケンスとメソッドのユーザビリティ強化

詳細は、『新しい ChemStation ワークフローから始める』マニュアルを参照してください。

使用可能なメソッド

メソッドは、拡張子 .M が付いた最大 40 文字の英数字の名前が付いています。メソッドは、ChemStation の最大 3 つのロケーションに保存されます。

- マスターメソッドはメソッドのサブディレクトリに保存され、ChemStation エクスプローラのメソッドのノードで使用できますが、データコンテナとは直接関連はありません。これらのメソッドは、データ取り込みに使用されます
- シーケンスが実行される場合は、シーケンスで使用されるマスターメソッドのすべてのコピーは、シーケンスデータファイルとともに、シーケンスデータコンテナに保存されます。これらのメソッドは直接シーケンスにリンクされ、シーケンスが再解析される場合にも使用されます。これらのメソッドへの変更は、マスターメソッドには影響しません。シーケンスの再解析中の変更は、シーケンスメソッドや個別のメソッドには影響します。
- さらに、サンプルの実行に使用したメソッドの 2 つのコピーは、データファイルで保存されます。ACQ.M は取り込みメソッドで、DA.M はデータ解析メソッドです。DA.M は、[プレファレンス] ダイアログボックスの [シグナルオプション] タブにある [**データファイルから DA メソッドを読み込む**] チェックボックスがオンになっている場合は、データファイルとともに読み込まれるメソッドです。このメソッドへの変更（たとえば、マニュアル積分など）は、関連するデータファイルに固有なもので、シーケンスメソッドやマスターメソッドには影響しません。

［データ解析］ビューのユーザビリティ強化

［**データ解析**］ビュー用の ChemStation エクスプローラを使うと、データセットとメソッドを読み込むことができます。ChemStation 構造のコンセプトによって、シーケンスデータコンテナの使用できるセットが特定のサブディレクトリに表示され、使用できるシングルランのセットも特定のサブディレクトリに表示されます。マウスの右クリックオプション［**読み込み**］を使用すれば、データセットをダブルクリックするか、メニュー機能を使用してシングルデータファイルを読み込むことにより、データセットを読み込むことができます。

シーケンスデータコンテナ

シングルランデータ

読み込まれたデータセットは、［**データ解析**］ビューの上部にあるナビゲーションテーブルにデータファイル毎に表示されます。

ナビゲーションテーブル

ナビゲーションテーブルは読み取り専用で、並び替え、異なる場所への列を移動するドラッグアンドドロップオプション、列選択など、標準テーブルコンフィグレーション機能が提供されます。さらに、列固有のグループ化は可能で、たとえば、特定のオペレータのシングルランは、列「オペレータ」によって読み込まれたファイルをグループ化することで表示できます。

ナビゲーションテーブルで、マウスの右クリック機能を使用して、シグナル、シグナル重ね書き、データのエクスポート、レポートの印刷などができます。ラインの開始点で +（プラス）記号をクリックして、シグナル固有のオプションを設定することで、ナビゲーションテーブルラインをそれぞれ拡張することができます。

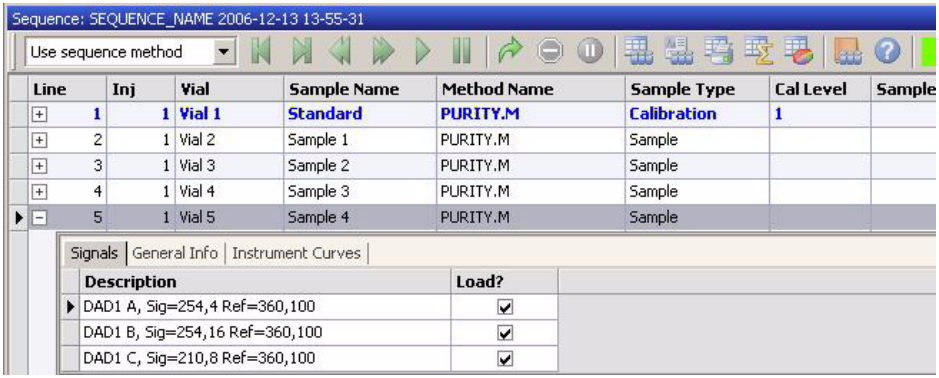


図 12　　データ解析でのナビゲーションテーブル

［プレファレンス］オプションによって、ChemStation エクスプローラに表示される追加パスをセットアップできることを覚えておいてください。さらに、［プレファレンス］ダイアログボックスには、データレビューに大きな影響を及ぼす［シグナル / レビュー］オプションが含まれます。

プレファレンス - シグナル / レビューオプションタブ

［プレファレンス］の［シグナルオプション］タブによって、シグナルが読み込まれた場合に取るアクションを指定できます。このタブの最初のセクション［**シグナルオプションの読み込み**］で、分析のどのシグナルを読み込むか、クロマトグラムを積分するか、結果が読み込み後に直接レポートされるかを指定します。

2 番目のセクション［**データレビューオプション**］では、ナビゲーションテーブル内の分析を自動的に進める間隔を設定できます。

このセクションの残りの部分では、分析がナビゲーションテーブルから読み込まれる時に、データレビュー中にどのメソッドが読み込まれるかを指定します。これらはデータレビューにのみ適用され、再解析には適用されません。

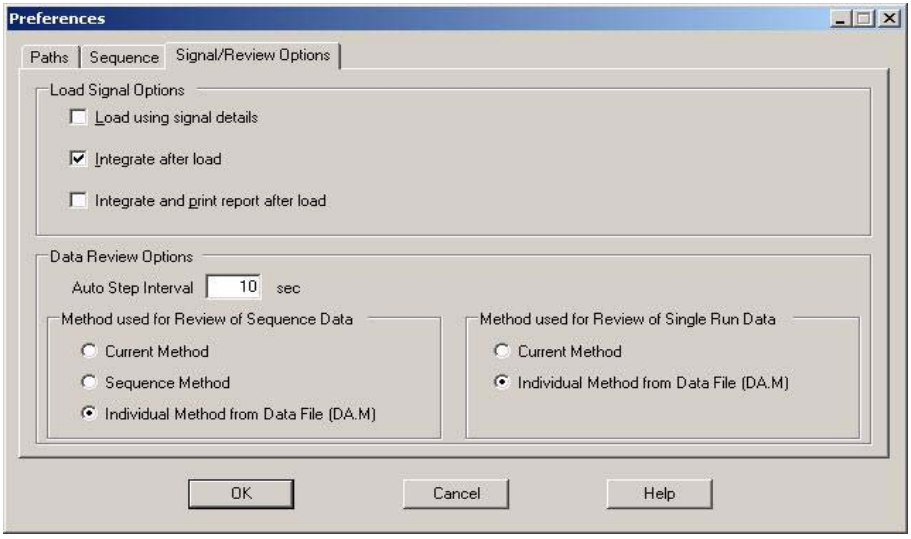


図 13　　シグナルオプションの環境設定

ナビゲーションテーブルレビューおよび再解析

追加レビューおよび再解析の機能を、B.02.01 以降で取り込むすべてのデータセットおよびシーケンスに対して**データ解析**ビューで使用できます。この新しい機能については、『新しい ChemStation ワークフローの入門』マニュアルとオンラインヘルプに詳細が記載されています。ChemStation リビジョン B.01.03 以前で取込んだシーケンスデータは、[メソッド&**ランコントロール**] ビューにある再解析オプションを使用して再解析する必要があります。

データレビュー：

ナビゲーションテーブルの新しいレビュー機能によって、読み込まれたシグナルを順々に自動的に処理することができます。[**プレファレンス / シグナル / レビュー**] オプションで定義された仕様に従って、自動的にシグナルを積分し、各ファイルについてのレポートを印刷することもできます。

[**プレファレンス / シグナル / レビュー**] オプションで [**現在のメソッドを使用**] オプションが選択されると、レポートをレビューおよび作成するために、システムは現在読み込まれているメソッドを使用します。ステータスバーにメソッド名が表示されます。

[**シーケンスメソッドを使用**] が選択されると、システムはナビゲーションテーブルから読み込む分析に対応するシーケンスメソッドを読み込みます。シーケンスメソッドはシーケンスコンテナにあります。メソッド名は、括弧で囲まれた「sequence」としてステータスバーに表示されます。

[**データファイル (DA.M) から個々のメソッドを使用**] オプションが選択されると、システムはデータファイルと一緒に保存された個々のデータ解析メソッド (DA.M) を読み込みます。ナビゲーションテーブル内の各行に選択されたデータファイルにリンクされた DA.M が読み込まれ、レビューやレポート作成に使用されます。ステータスバーにメソッド名が表示され、「from data file」には括弧が追加されて (DA.M) となり、読み込まれたメソッドがデータファイル固有メソッドであることがわかります。

データ再解析 (ChemStation B.02.0x で取り込まれたデータ):

再解析機能を使用して、乗数、希釈率など、メソッド設定を変更したり再解析に異なるメソッドを使用するために、データコンテナの sequence.s ファイルを変更することができます。sequence.s はシーケンスデータコンテナの一部であり、**データ解析**画面で開くことができます。デフォルトでは、データ解析にある sequence.s ファイルのシーケンスパラメータ**「メソッド部分実行」**は、**「再解析のみ」**に設定され、**「シーケンステーブル情報を使用」**オプションが選択されます。予め設定されているデフォルト値によって、sequence.s ファイルが変更され、データ解析シーケンスパラメータを再び編集することなく、再解析を続行することができます。再解析中には、データファイルについての固有のメソッド DA.M は、batch.b ファイルとともに更新されます。

sequence.s ファイルにあるメソッドを変更していない場合は、システムでは、シーケンスの再解析にはシーケンスデータコンテナに保存されたメソッドが使用されます。このメソッドは、データ取得中に使用された元のメソッドです。特定のメソッドパラメータを変更する必要がある場合は (*.xls ファイルに出力することを指定する、など)、シーケンスコンテナにあるメソッドは変更して保存する必要があります。この一般的な変更は、再解析中にすべてのデータファイルに適用されます。

データ取込に、アップデータされたシーケンスコンテナメソッドを使用する場合は、このメソッドをシーケンスデータコンテナから定義済みのメソッドパスにコピーする必要があります。新しいメソッドまたは更新されたメソッドは、ChemStation エクスプローラのメソッドビューでマスターメソッドとして利用可能になります。

注記

ナビゲーションテーブルは、複雑なバッチ機能の替わりとして使用することはできません。[**バッチ**] ビューは**データ解析**画面で使用でき、バッチ機能は変更されていません。

[ユニークなフォルダ作成] をオフに切り換え

新しいデータ構成スキームには、以下のような多くの利点があります。

- シーケンスデータは上書きされません。シーケンスの取り込みごとに、結果のデータファイルを一意の名前で独自のシーケンスコンテナに保存します。
- シーケンスコンテナの概念では、データはデータ解析に必要な情報、つまりシーケンスファイルのコピーとシーケンスで使用されるすべてのメソッドのコピーとともに保存されます。これらのメソッドをシーケンスに固有に入力、変更して、元のマスターメソッドには影響を及ぼさないようにすることが可能です。このような理由から、コンテナの概念は、結果作成のために一連のデータファイルとメソッドが 1 つのシーケンスとしてグループを構成していることの意義を深めています。
- データレビューと再解析は、ナビゲーションテーブルによって [**データ解析**] ビューで両方使用できます。
- データコンテナコンセプトにより、ECM を使用した ChemStation での積分のために最適な前提条件が提供されます。

ただし、ユーザーが ChemStation B.01.03 以前の形式でデータを保存し、それに対応するワークフローに従って作業をするような状況が発生する可能性があります。

- メソッドの開発中は、取り込みとデータ解析両方に対応する 1 つのメソッドを使用し、次の取り込みとすでに取り込んだデータの再解析のために変更が自動的に利用できるようにしたほうが便利であると考えられます。
- 部分取り込みの場合など、複数の取り込みからのデータが 1 つのフォルダに保管される必要があります。
- ChemStation システムの古いリビジョン用に設計されている、カスタマイズされたマクロソリューションでは、古いデータ構成スキームに従ってデータ、メソッド、またはシーケンスを保存する必要がある可能性があります。

- ChemStation リビジョン B.01.03 以前で動作しているシステムがあるラボで ChemStation B.03.01 を使用する場合は、すべてのシステムで同じデータ構成モードを使用するほうが便利です。

B.02.01 より前の ChemStation リビジョンで使われていたデータ保存概念を使って作業できるようにするため、[**プレファレンス**] ダイアログボックスの [**シーケンス**] タブには [**データ保存**] セクションが用意されています。ここでは、[**ユニークなフォルダ作成オン**] と [**ユニークなフォルダ作成オフ**] のいずれかを選択できます（『99 ページ 図 14』）。デフォルトでは、[**ユニークなフォルダ作成オン**] が選択されています。[**ユニークなフォルダ作成オン**] を使えば、上述したデータ保存コンセプトが有効になります。[**ユニークなフォルダ作成オフ**] を使えば、ChemStation B.01.03 以前の方式でデータを保存できます。詳細は、『新しい ChemStation ワークフロー入門』マニュアルを参照してください。

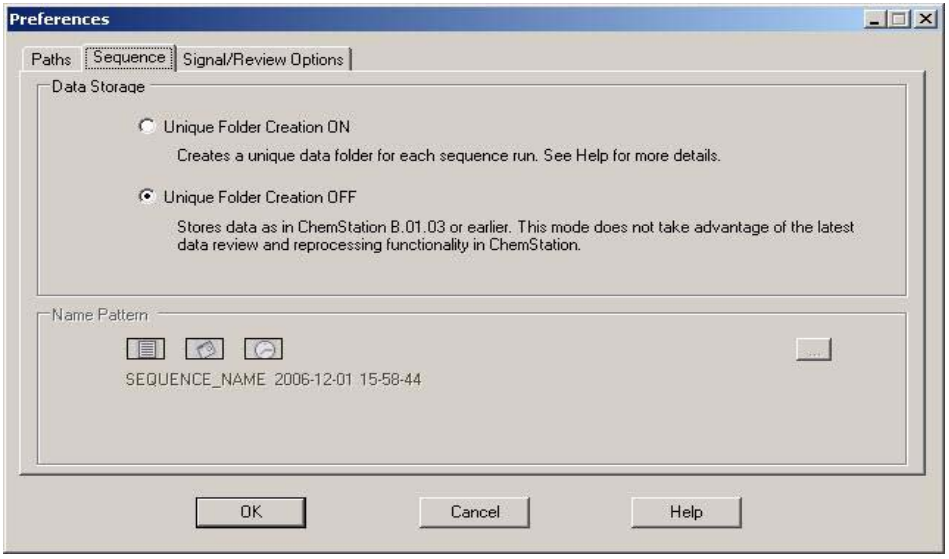


図 14　プレファレンス ダイアログ / シーケンスタブ

注記

[**ユニークなフォルダ作成**] をオンまたはオフに切り換えると、後の取り込みに影響を及ぼしますが、既に取り込んだデータのデータ構成は変更されません。

注記

作業開始時に 2 つのモードのいずれかに決定し、以後は切り換えないことをお勧めします。

ChemStation OpenLAB または ChemStore/ セキュリティパックがインストールされたシステムでは、[**ユニークなフォルダ作成**] をオフに切り替えられません。

ChemStation B.02.01 で導入された ChemStation 拡張ユーザーインタフェースは、[**ユニークなフォルダ作成**] がオフの場合でも使用できます。ただし、このモードでは利用できない機能があります。同じ制限が ChemStation B.02.01 以前を使用して取り込まれたいずれの分析にも適用されます。

- シーケンスがナビゲーションテーブルに読み込まれる際に、再解析ツールセットはグレーアウトします。このデータ保存モードで取り込まれたシーケンスは、[**シーケンスパラメータ**] の [**再解析のみ**] オプションを使用した [**メソッド & ランコントロール**] ビューでのみ再解析できます。
- メソッド使用法のオプション [**データファイルからのメソッドを使用**] と [**シーケンスメソッドを使用**] を指定した場合は、個々のメソッド / シーケンスメソッドが存在しないナビゲーションテーブルの分析をダブルクリックするたびに警告メッセージが表示されます。前に説明したように、これらのメソッドはデータといっしょには保存されません。この場合は、データレビューのために意義のあるオプションは [**現在のメソッドを使用**] だけということになります。

長いファイル名

ChemStation リビジョン B.0x.0x では、次の ChemStation ファイルでの長いファイル名の使用がサポートされています。

- データ
- メソッド
- シーケンス、ハイパーシーケンス
- バッチ
- スペクトルライブラリ

- レポートテンプレート
- マクロファイル
- サブディレクトリ
- サンプル名（B.01.03 以降）

長いファイル名は、ChemStation のグラフィックインターフェイスおよびレポートレイアウトに影響を与えます。

長いファイル名を受け入れるので、ChemStation 画面はすべてサイズ変更されています。グラフィックの要素は拡大され、メソッド、シーケンスなどの長いファイル名は、すべての画面および入力 / 出力フィールドにそれに従って表示されます。グラフィックの理由によって、グラフィックビューにある長いファイル名は、18 文字までと制限されています。

図 15　［メソッド&ランコントロール］スクリーンショット

すべての ChemStation レポート（データレポート、メソッド / シーケンス印刷など）は再設計されて、長いファイル名がサポートされるようになりました。また、ChemStation ログブックでは、システムメッセージの拡張形式が使用されます。長い情報文字列は完全に印刷されます。必要に応じて、情報は複数行にわたって印刷されます。シーケンスレポートなどの特定のレポートでは、長いファイル名が切り捨てられ、レポートテンプレートに情報すべてがおさまるようにされることもあります。

```
Method and Injection Info Part:

Line Location SampleName              Method                Inj      SampleType InjVolume
              DataFile                LimsID                FractSt  TargetMass
==== ======== ====================== ===================== ======== ========== =========
  1  Vial 1   1                      DEMOCAL1BUTEXTENDEDT  1        Calib      0.5
              ALlongDataFileNameWit  10483LimsId           P1-S1    0.5;4.5
  1  Vial 1   1                      DEMOCAL1BUTEXTENDEDT  1        Calib      0.5
              ALlongDataFileNameWit  10483LimsId           P1-S1    0.5;4.5
```

図 16　シーケンスレポート抽出

注記

ほとんどすべての画面には、長いファイル名の受け入れが反映されます。データファイル / シーケンス / メソッドの名前を表示するツールバーは、18 文字までを表示できるようにサイズ変更されます。

ファイルの命名規則

命名規則

次の規則によって、ChemStation ではファイルとディレクトリで有効な名前の作成と処理ができます。

以下の文字はファイルまたはディレクトリ名には含めません。

< > : " / ¥ | @ % * ? ' & 空白（スペース）など。

これらの文字をファイルまたはディレクトリ名に使用すると、ChemStation にファイルをロードする際にエラーが発生する原因となることがあります。インストールフォルダにこれらの文字が含まれる場合、解析画面は起動しません。また、インストールフォルダに「%」文字が含まれていた場合には、「Agilent ChemstationB.04.02」の一部のショートカットは正しく動作しません。

次の規則も適用されます。

表 16　制限された文字

ChemStation パラメータ	[文字]
メソッドファイル名 :	% アンド .（小数点）は使用できません
データファイル名（プレフィックス / カウンタ）	空白にすることはできません
データサブディレクトリおよびシーケンスサブディレクトリ :	[] + = ; , .（小数点）、スペースは使用できません

次の予約済みデバイス名は、ファイル名としては使用できません。

- CON、PRN、AUX、NUL

- COMx（ここで x は 1 ～ 9 の数字）
- LPTx（ここで x は 1 ～ 9 の数字）

また、この名前を拡張子の前に付けることも避けてください（Nul.txt など）。

注記

英語、日本語、中国語のオペレーティングシステムは、命名規則をテストするのに使用されます。Agilent は英語以外のオペレーティングシステムおよび特別文字についての構文はサポートされません。

ChemStation ファイル名とサブディレクトリの最大の長さ

ファイル名およびサブディレクトリの Agilent ChemStation 仕様は、以下に記載されています。

表 17　ChemStation ファイル名とサブディレクトリの最大の長さ

データファイル / サブディレクトリ / パス	最大入力長	自動付加	例
データファイル名	38	.D	Demodad.d
プレフィックス / カウンタを使用するデータファイル名	15	.D	longname000001.d
メソッド シーケンス ハイパーシーケンスライブラリカスタマイズされたレポートテンプレート	40	. M . S . HYP . UVL . FRP	def_lc.m def_lc.s def_lc.hyp demodad.uvl areapct.frp
データファイルサブディレクトリ	40		demo（サンプル情報で）
データシーケンスサブディレクトリ	40		demo（シーケンスパラメータで）
シーケンスデータコンテナ名	40		test_date_time（シーケンス設定を使用して作成）

表 17 ChemStation ファイル名とサブディレクトリの最大の長さ

データファイル / サブディレクトリ / パス	最大入力長	自動付加	例
データパス	100	100	c:¥chem32¥1¥data
メソッドパス			c:¥chem32¥1¥methods
シーケンスパス			c:¥chem32¥1¥sequence
ハイパーシーケンス パス			c:¥chem32¥1¥hyper
ライブラリパス			c:¥chem32¥speclib
カスタマイズされたレポートテンプレートパス			c:¥chem32¥repstyle

ChemStation のすべてのログブックはシステムメッセージを拡張されたフォーマットでレポートし、情報文字列は複数行に渡って印刷されます。シーケンスレポートなどの特定のレポートは、すべての情報がレポートテンプレートに収まるように、ファイル名を切り詰めることがあります。

プレフィックス / カウンタ

[プレフィックス / カウンタ] を使用してデータファイルに名前を付ける場合は、ChemStation によって各分析に対して名前が 1 つ生成されます。GC などのように、機器がデュアルシグナル分析をしている場合は、ChemStation によって各シグナルに対して名前が 1 つ生成されます。

データファイルまたはシーケンスの [プレフィックス / カウンタ] コンポーネントは、長いファイル名を使用できるように拡張されました。[プレフィックス / カウンタ] で定義されたデータファイル名には、15 までの文字と .d の拡張子を含めることができます。合計で 17 文字です。

次の規則は、[プレフィックス / カウンタ] フィールドに適用されます。

- カウンタ自体は最大 6 文字までです
- プレフィックスの文字数が 9 未満の場合は、カウンタは自動的に 6 桁に拡張されます
- カウンタにある数は、インクリメントを開始する数です。

表 18 プレフィックス / カウンタ

プレフィックス	カウンタ	ファイル名
長い	000001	long000001
longname	000001	longname000001
testwithalongna	1	testwithalongna1

ChemStation リビジョン A.xx.xx からのデータ読み込み

ChemStation リビジョン A.xx.xx からのデータ読み込み

ChemStation リビジョン B.0x.0x では、32 ビットベースのソフトウェアアーキテクチャを使用し、文字セットは Unicode です。このセクションでは、アップロードしたデータ、メソッド、シーケンスなどの取り扱いの概要を説明します。

データファイル

リビジョン B.0x.0x データをアップロードしても変更はされていません。データファイルは積分して B.0x.0x 内で使用することができ、下位互換性は保持されます。データ構造が変更されているので、リビジョン B.0x.0x で取込んだデータファイルは下位互換性がありません。

注記

PASCAL ファイルおよび 3365 ファイルのリビジョン B.0x.0x へのインポートは今後はできません。これらのファイルが必要な場合は、最初に ChemStation リビジョン A.xx.xx にインポートして、ChemStation ファイルに変換する必要があります。

一般に、旧いデータ構造を使用する以前の ChemStation リビジョンからのすべてのファイル（メソッド、シーケンス、ログファイルなど）は、B.0x.0x に読み込むことができます。保存中に、これらのファイルはシステムによって新しい 32 ビット構造に変換されます。新しい構造セットに変換すると、これらのファイルに下位互換性はなくなります。ファイルを別の名前で保存するように警告を受けるので、必要であれば 16 ビット

ファイルおよび 32 ビットファイルのセットの両方を保存することができます。16 ビットファイルは変更されないままなので、ChemStation リビジョン A.xx.xx では引き続き使用できます。

メソッド

ChemStation の旧リビジョンで作成されたメソッドはすべて、リビジョン B.0x.0x で読み込めます。「以前の」スペクトル / 純度オプションまたは、拡張積分の**標準インテグレータ**または**拡張ベースライン**オプションを使用する積分がメソッドに含まれる場合は、警告が表示されます（「『106 ページ 図 17』」を参照）。これらのメソッドパラメータは自動的に新しい B.0x.0x 機能に変換されます。メソッドは**変更されたメソッド**フラグを受け取り、変更を反映します。この変換についての詳細は、「『「定量メソッドへのアップグレードの影響（リビジョン A.xx.xx からのアップグレードに関連した内容のみ）」125 ページ 図』」を参照してください。

図 17 インテグレータの警告

データ構造が変更されているため、リビジョン B.0x.0x で作成されたメソッドは下位互換性がありません。

シーケンス

以前の ChemStation リビジョンで作成されたシーケンスはすべて、リビジョン B.0x.0x に変更できます。シーケンスに 16 ビット構造があるかどうかがシステムによって検出され、それに従ってシーケンスが処理されます。プレフィックス / カウンタおよび自動命名規則はリセットされ、8 文字セットを使用します。これによって、アップロードされたシーケンスを再解析することができます。

アップロードされたシーケンスを保存する場合は、別の名前で保存するように警告されます。この場合は、元のシーケンスは以前のデータ構造で保持され、下位互換性があります。

データ構造が変更されているので、リビジョン B.0x.0x で作成されたシーケンスは下位互換性がありません。

ハイパーシーケンス（LC ChemStation のみ）

以前の ChemStation リビジョンで作成されたハイパーシーケンスはすべて、リビジョン B.0x.0x に変更できます ハイパーシーケンスに 16 ビット構造があるかどうかがシステムによって検出され、それに従ってハイパーシーケンスが処理されます。プレフィックス / カウンタおよび自動命名規則はリセットされ、8 文字セットを使用します。これによって、アップロードされたハイパーシーケンスを再解析することができます。

アップロードされたハイパーシーケンスを保存する場合は、別の名前で保存するように警告されます。この場合は、元のシーケンスは以前のデータ構造で保持され、下位互換性があります。

データ構造が変更されているので、リビジョン B.0x.0x で作成されたハイパーシーケンスは下位互換性がありません。

バッチファイル

以前の ChemStation リビジョンで作成されたバッチファイルはすべて、リビジョン B.0x.0x に変更できます。バッチは実行でき、マニュアル積分イベントはバッチに保存できます。バッチファイルをすぐに保存しない場合は、リロードしてすぐにこのバッチを保存する必要があります。

アップロードされたバッチファイルを保存する場合は、別の名前で保存するように警告されます。この場合は、元のバッチファイルは以前のデータ構造で保持され、下位互換性があります。

レポートスタイル

以前の ChemStation リビジョンで作成されたレポートスタイルはすべて、リビジョン B.0x.0x に変更できます。

アップロードされたレポートスタイルを保存する場合は、別の名前で保存するように警告されます。この場合は、元のレポートスタイルは以前のデータ構造で保持され、下位互換性があります。

UV ライブラリ（LC および CE 3D ChemStation のみ）

以前の ChemStation リビジョンで作成された UV ライブラリはすべて、リビジョン B.0x.0x に変更できます。「以前の」スペクトル / 純度オプションを使用して確立された UV ライブラリは、「新しい」スペクトル / 純度セットに適合させる必要があります。

この変換に関する詳細は、『「「新しい」スペクトル / 純度ツールセットへのアップグレード」167 ページ 図』に文書化されています。

アップロードされた UV ライブラリを保存する場合は、別の名前で保存するように警告されます。この場合は、元の UV ライブラリは以前のデータ構造で保持され、下位互換性があります。

5 コンプライアンス情報

リビジョン B.04.0x のアップグレードについての一般コンプライアンス情報 110
概要 110
ソフトウェアアップグレードの適格性確認 110
アップグレードの検証 111
HPLC 1100 OQ/PV メソッドおよびシーケンスファイルのアップグレード 112
新しいインストール用の HPLC 1100 OQ/PV のファイル例 112

この章では、『ソフトウェアアップグレードの適格性評価』についての概要と、OQ/PV 使用法の変更点について説明します。

リビジョン B.04.0x のアップグレードについての一般コンプライアンス情報

概要

Agilent ChemStation システムソフトウェアをコンピュータにインストールし分析システムを設定した後、インストールが正しく完了したかを評価し、分析システムが完全に動作可能かを検証します。この手順は部署内でのバリデーション手順の規定により必要な場合があります。

ソフトウェアアップグレードの適格性確認

ご使用の ChemStation ソフトウェアのアップグレードと同様、Agilent ではリリース B.04.0x のインストール後に完全な据付時適格性確認（IQ）および稼働性能適格性確認（OQ/PV）の実行をお勧めしています。これはバリデーション マスタープランに従うバリデーションの必要性に役立ち、またこのプランには設計的確性確認（DQ）および性能適格性確認（PQ）が含まれる必要があります。

Agilent からの稼働性能適格性確認サービスによって、受容されたパフォーマンスパラメータに従って新しい ChemStation が実行される証拠が記載されます。特に、クロマトグラフベリフィケーションテスト一部として、新しい積分アルゴリズムの操作も確認します。対象となる他の重要な領域は、機器通信および制御、またデータセキュリティおよびアクセス制御です。

Agilent の NDS 適格性サービスの非常に重要な特性は、自動化が非常に進んでいることと適格性のあるシステムとの深い双方向性です。これによって、システムのダウンタイムが削減されるだけでなく、プロセスを信頼性と一貫性を持って実行することができるので、監査の前にリスクを最小化します。

アップグレードの検証

コンピュータ内の Agilent ChemStation システムソフトウェアをアップグレードし、分析システムを設定した後は、社内の検証手順によっては、インスタレーションの正確さと完全性の評価と、分析システムが完全に動作可能であることの検証を求められる場合があります。

Agilent ChemStation **IQ レポート** ユーティリティは、工場出荷のインスタレーションリファレンスファイルを使用して、必要な Agilent ChemStation システムファイル（実行プログラムファイル、バイナリレジスタファイル、マクロファイル、初期化ファイル、ヘルプファイル、カスタマイズされたレポートテンプレート）の存在、正確性、完全性を検証します。これは、据付時適格性評価（IQ）に含まれる場合もあります。

ファイルの完全性は、インストールされたファイルの 32 ビット巡回冗長検査（CRC）と、Agilent Technologies インスタレーションマスターに記録された元のファイルのチェックサムの比較によって検証されます。インスタレーションマスターのファイルの詳細は、いわゆる**リファレンスファイル**として提供されます。変更または破損のあったリファレンスファイルはチェックサムが異なります。そのため、**IQT レポート** ユーティリティで検出されます。

リファレンスファイル自体の完全性も、チェックサムを使って検証できます。ソフトウェアインスタレーションの検証ユーティリティが、作成後に変更されたリファレンスファイルとともに提供されている場合は、レポート内に表示されます。

さらに、**IQT レポート** ユーティリティは、Agilent ChemStation 実行可能システムファイル（*.EXE、*.DLL）のバージョンコードをチェックします。

HPLC 1100 OQ/PV メソッドおよびシーケンスファイルのアップグレード

Agilent ChemStation のリビジョン B.04.0x は、旧バージョンと同じ［**ベリフィケーション**］ビューを備えていますが、1100 シリーズ LC システムで適格性評価を行うための補助として使用できる 1100 OQ/PV メソッドやシーケンスのサンプルファイルは持っていません。

しかし、リリース A.10.02 からの同じサンプルファイルは B.04.0x と互換性があるため、使用を続けることができます。使用を続けるためには、ChemStation A.xx.xx をアンインストールする前にそれらのファイルをバックアップする必要があります。ChemStation A.xx.xx をアンインストールしたら、新しいリビジョン B.04.0x をインストールできます。B.04.0x のインストールが完了すれば、バックアップディレクトリから新しい ChemStation ディレクトリにファイルをコピーできます（デフォルトディレクトリがインストールに使用された場合）。

OQ/PV メソッドは以下のディレクトリにコピーしてください。

- C:¥CHEM32¥X¥METHODS¥OQPV、ここで x は機器番号です

OQ/PV シーケンスは以下のディレクトリにコピーしてください。

- C:¥CHEM32¥X¥SEQUENCE¥OQPV、ここで x は機器番号です

注記

ChemStation B.04.02 で OQ/PV テストを実行できるのは、クラシック LC ドライバを使っている場合だけです。

新しいインストール用の HPLC 1100 OQ/PV のファイル例

以前のインストールから入手できない場合は、1100 OQ/PV サンプルファイルは、Agilent から購入できます。CD-ROM には QO/PV ヘルプファイルが含まれており、これは A.10.02 ChemStation で使用可能だったものです。次の参照を使用してください。

P/N 01100-60050 1100 Verification Sample Files CD-ROM

これらのファイルは、Agilent OQ/PV 適格性確認サービスに含まれているので、Agilent で機器の適格性確認を実行する場合には、これを取得する必要はありません。

6 カスタマイズされたソリューションへの影響

マクロソリューションの新しいデータ構造の影響 114
ツールバーのカスタマイズ 114
メニューバーのカスタマイズ 114
データ構造の ChemStation マクロへの影響 114
ChemStation A.xx.xx のアップグレードがマクロソリューションに与える影響 118
概要 118
ユーザー寄稿ライブラリ (UCL) 119
カスタマイズされたマクロおよび User.mac 119
Unicode から ANSI への変換 120
DDE 120
ODBC 120
LC ChemStation で RC.NET ドライバの使用がマクロソリューションに与える影響 121

マクロなどのカスタマイズされたソリューションの使用法および書き方や、Unicode 形式で書き直すのに必要な操作についても記載しています。

マクロソリューションの新しいデータ構造の影響

ChemStation Revision B.02.01 から、大幅に改良されたユーザーインタフェース（UI）と、新しいナビゲーションコンセプトが導入されました。このコンセプトのすべての要素と ChemStation UI での新しいコントロールは、Microsoft.NET Framework に基づいています。

ツールバーのカスタマイズ

ChemStation のツールバーコマンドは、Microsoft.NET Framework の使用により、ChemStation リビジョン B.03.01 で変更されました。リビジョン B.01.03 までの ChemStations のツールバーコマンドを利用した、既存のカスタマイズソリューションは、修正しない限り ChemStation リビジョン B.04.02 では実行できません。詳細は、オンラインヘルプを確認してください。

メニューバーのカスタマイズ

メニューバーの追加や変更のための ChemStation マクロ言語に、変更はありません。一般に、既存のカスタマイズされたソリューションは、変更せずに、ChemStation リビジョン B.04.02 で実行可能です。

データ構造の ChemStation マクロへの影響

ChemStation B.02.01 から、新しいデータ整理コンセプトが導入され、ChemStation B.04.02 SP1 では追加拡張を提供します。[**環境設定**] 内で [**ユニークなフォルダ作成オン**] か [**ユニークなフォルダ作成オフ**] を定義することにより、ソフトウェアでデータを取り込むために使用するデータ構成コンセプトを選択できます。デフォルトでは、[**ユニークなフォルダ作成オン**] が選択されています。[**ユニークなフォルダ作成オン**] を使えば、『「B.03.0x と B.02.0x で導入されたスタートアップの変更」85 ペー

ジ 図』で説明したデータ保存コンセプトが有効になります。[**ユニークなフォルダ作成オフ**] により、リビジョン B.01.03 以前の ChemStation のようにデータを保存できます。詳細は、『新しい ChemStation ワークフロー入門』マニュアルをご覧ください。

[ユニークなフォルダ作成] オン

データ保存モードにより、ChemStation B.02.01 で導入された新しいデータ構造を使用できます。ChemStation マクロを確認して、必要に応じて新しいパス項目を適合させてください。

ChemStation リビジョン B.02.01 SR1 以降で [**ユニークなフォルダ作成**] オン を使う場合は、以下のパス変数が適用されます。

表 19　シーケンスのパス

	メソッド & ラン コントロール		データ解析	
	シーケンスラン	シーケンスランなし	再解析	再解析なし
_DataPath$	シーケンスデータコンテナへのパス [1]	デフォルトのデータパス (_ConfigDataPath$)	再解析中のシーケンスデータコンテナへのパス	デフォルトのデータパス (_ConfigDataPath$)
_DataSeqSubDir$	空	現在のシーケンステンプレートのサブディレクトリ	空	空
_SeqPath$	シーケンスデータコンテナへのパス	現在のシーケンステンプレートへのパス	現在のシーケンスデータコンテナへのパス	現在読み込まれているシーケンスデータコンテナへのパス
DaDataPath$	未定義	未定義	再解析中のシーケンスデータコンテナへのパス	現在読み込まれているシーケンスデータコンテナへのパス

[1] シーケンス起動時（プレシーケンスフックの実行前）は _DATAPATH$ には、次の値が設定されます。_DATAPATH$ = _DATAPATH$ + _DATASEQSUBDIR$ + <Name of Sequence container>（[シーケンスパラメータ] ダイアログ内のパスにデフォルトのデータパスが設定されている場合）_DATAPATH$ = TabHdrText$(_Sequence, "SeqParm", "DataDir") + _DATASEQSUBDIR$ + <Name Sequence container>（[シーケンスパラメータ] ダイアログ内のパスがデフォルトのデータパスとは異なる場合）

表 20　シングルランのパス

	メソッド & ランコントロール	
	シングルラン	ランなし
_DataPath$	現在のランのデータディレクトリ (=ConfigDataPath$)	デフォルトのデータディレクトリ
_ConfigDataPath$	現在のランのデータディレクトリ	[サンプル情報] ダイアログ内のデータディレクトリセットを含みます。ChemStation スタートアップ時に _DataPath$ が設定されます。
_DataSubDir$	現在のランのサブディレクトリ	[サンプル情報] ダイアログ内のサブディレクトリセット

[ユニークなフォルダ作成] オフ

このデータ保存モードを使うと、ChemStation B.01.03 以前の方式でデータを保存できます。ChemStation B.01.03 以前で作成された ChemStation マクロは、このモードを使えば作成しなおす必要はありません。

ChemStation リビジョン B.02.01 SR1 以降で **[ユニークなフォルダ作成] オフ** を使う場合は、以下のパス変数が適用されます。

表 21 ［ユニークなフォルダ作成オフ］時のパス変数

	メソッド & ランコントロール		データ解析	
	シーケンスラン	シーケンスランなし	再解析	再解析なし
_DataPath$	デフォルトのデータパス (_ConfigDataPath$)	デフォルトのデータパス (_ConfigDataPath$)	デフォルトのデータパス (_ConfigDataPath$)	デフォルトのデータパス (_ConfigDataPath$)
_DataSeqSubDir$	現在のシーケンステンプレートのサブディレクトリ	現在のシーケンステンプレートのサブディレクトリ	空	空
_SeqPath$	現在のシーケンステンプレートへのパス	現在のシーケンステンプレートへのパス	該当なし	最後に読み込まれたシーケンスデータコンテナへのパス
DaDataPath$	未定義	未定義	該当なし	現在読み込まれているシーケンスデータコンテナへのパス

ChemStation A.xx.xx のアップグレードがマクロソリューションに与える影響

概要

ChemStation リビジョン B.04.0x では、システムでは文字を表現するエンコードシステムとして Unicode 標準を使用します。Unicode では、プラットフォーム、プログラム、言語に関わらず、すべての文字について一意の数字が割り当てられています。各ファイルヘッダには、Unicode エンコードを使用する場合の情報が含まれています。ChemStation で生成されるすべてのマクロまたはレポートファイルは Unicode で表現されます。

使用できるプログラムの多くは、Word や NotePad などの Unicode をサポートしている プログラムでファイルを読み取ることができます。ただし、アプリケーションの中には、Unicode ベースのファイルを開けないものもあります。

ChemStation で生成された次のテキストファイルは、Unicode で書かれています。

- *.txt
- *.log
- clusterx.mth（ここで x は装置番号です）
- *.ms
- *.inf
- *.dif

次のコマンドで生成されたファイルはどれも、Unicode で書かれています。

- PRINT #
- PRINT USING #
- OPEN #
- CLOSE#

ユーザー寄稿ライブラリ（UCL）

ユーザー寄稿ライブラリ（UCL）は、ChemStation DVD-ROM の UCL ディレクトリに置かれます。このライブラリには、LC、GC、LC/MS ChemStations のマクロとユーティリティのセットが含まれています。このライブラリの内容は、ChemStation ソフトウェアのユーザーが特定のニーズを満たすようにインストールを開発してカスタマイズするのに役立つように意図されています。ライブラリの内容は、Agilent 内部およびユーザー寄稿ソフトウェアの両方から成り、寄稿はどんなものでも歓迎されます。各寄稿は、機能性は検査されていますが、正式なテスト手順で検証を実施したものでは在りません。したがって、Agilent Technologies はベストエフォートで UCL プログラムをサポートします。

Unicode エンコードに移行しても、UCL マクロファイルは変更されません。UCL マクロは、設計された環境内でのみ動作します。特定の UCL マクロを変更して条件を満たすようにし、他のアプリケーションで使用できるファイル形式にする場合は、これらのファイルを ANSI 形式に変換する必要がある場合があります。

カスタマイズされたマクロおよび User.mac

マクロの読み込みと実行を自動化すると、ChemStation を無人で操作することができます。ChemStation 実行可能ディレクトリにあるという USER.MAC マクロファイルを定義できます。このディレクトリの名前はインストールによって異なります： xx:¥< 元のインストールパス >¥Core、デフォルトは c:¥chem32¥Core です。

user.mac では、コマンドを置いて、ChemStation 内で自分のマクロを読み込んで実行します。ChemStation リビジョン B.0x.0x から ChemStation リビジョン B.04.0x へのアップグレード中に、ご自身のマクロは Chem32_001 バックアップディレクトリに移動されますが、アップグレード済みシステムへの自動コピー処理中には移動されません。マクロファイルは、構造に従って、手動で、移動する必要があります。

カスタムアプリケーションが Unicode ベースファイルを開けない場合は、ANSI への変換が必要です。『「Unicode から ANSI への変換」120 ページ図』を参照してください。

Unicode から ANSI への変換

インストールしたカスタムソリューションでは、使用するプログラムが unicode ベースのファイルを読み取ることができるかどうかの確認が必要です。そうでない場合は、プログラムは unicode エンコードができるように変更するか、ファイルを ANSI 標準ファイルに変換する必要があります。

Agilent には、変換ツール「UnicodeToAnsi.exe」があり、インストール中に次のディレクトリに自動的にインストールされます。x:¥Chem32¥sys

このツールによって、Unicode ベースのファイルの ANSI 標準ファイルへの変換が簡単になります。このツールは、Unicode ベースのファイルが作成された後に実行する必要があります。次のマクロは、使用法を示します。

```
a= execnowait (“UnicodeToAnsiFile.exe ” + “c:¥temp” +”¥ansi.txt” )
```

注： UnicodeToAnsiFile.exe の後に空白がある必要があることに注意してください。

DDE

DDE (Dynamic Data Exchange) を使用する情報交換は、ChemStation からの情報転送に使用できます。

ODBC

ODBC の使用は、Chemstation B.04.02 ではサポートされていません。アジレントは、データ交換形式として XML を使用するオプションと、データ管理システムとして ChemStore を提供しています。

LC ChemStation で RC.NET ドライバの使用がマクロソリューションに与える影響

ChemStation B.04.02 は、大部分の 1100/1200 LC 機器モジュール用の新しいドライバセット（RC.NET ドライバ）を備えています（『73 ページ 図　表 10』～『76 ページ 図　表 14』を参照）。これらのドライバを使うと、新しいユーザーインタフェースが利用可能になります（『「LC ChemStation の新しいユーザーインタフェース」71 ページ 図』を参照）。これらの機器ドライバの新しい構造では、メソッドへの機器パラメータの格納方法を変更する必要があります。B.04.02 より前の ChemStation リビジョンでクラシックドライバを使っていたときは、機器パラメータは .reg ファイル（たとえば、ポンプパラメータの場合は、LPMP1.reg）に格納されていました。

1100/1200 モジュールで RC.NET ドライバを使う場合は、取り込みパラメータは、.xml タイプのファイルに格納されます。この変更は、メソッドの機器パラメータを読み書きするためのマクロコマンドの変更も必要であることを意味します。

変更のサマリ

新しい RC.NET ドライバには、たとえば、メソッドパラメータやステータス情報に、アクセスするためのレジスタインタフェースが残っています。主要な違いは以下のとおりです。

- レジスタ名が、クラシックドライバで使われていたものとは異なります。
- 旧モジュールのステータスレジスタの内容は、ステータスレジスタとコンフィグレーションレジスタの 2 つのレジスタに分散されました。
- レジスタ内のヘッダ項目とテーブル名の大部分は、異なっています。
- ヘッダ項目の一部は、2 つに分割されました。例：[**ストップタイム**] は、[StopTime_Time] と [StopTime_Mode] に分割されました。ここで [StopTime_Mode] は、SET か NOLIMIT のいずれかです。
- サンプラのインジェクタプログラムはメソッドではなく、新しい [**前処理**] レジスタに含まれるようになりました。

互換性上の理由で、
SendModule$ のように広く使われるコマンドは、RC.NET ドライバでも使えるようになっています。また、新しい RC.NET 固有のコマンドも使うことができます。

7 再解析データのタイムスタンプおよびレポート メソッドにおけるアップグレードの影響

この章はリビジョン A.xx.xx. からのアップグレードにのみ関連します。

16-bit ChemStation A.xx.xx のデータファイルまたはメソッドを、32-bit ChemStation B.0x.0x でレビューまたは再解析すると、16-bit ChemStation のレポートにおけるタイムスタンプとは異なる場合があります。ソフトウェア アプリケーションにおける業界基準では、タイムスタンプはユニバーサルタイム (UTC) で保存されます。これにより異なるタイムゾーンでのデータ交換や、現地時間に基づく正しい時間および時間情報の表示が可能になります。

Microsoft Windows では現地時間とユニバーサルタイムの変換のため、API (アプリケーション・プログラミング・インターフェース) で特別な機能を提供します。これらの Windows の機能は、ご利用の PC の設定に伴うタイムゾーン情報を利用します。16-bit プログラムはすべて (16-bit ChemStation リビジョン A.xx.xx など) 16-bit Windows API を利用します。16-bit の環境においては、Windows は TZ と呼ばれる特定の環境変数を利用し、PC のタイムゾーンを特定します。変数の設定が行われない場合、Windows はデフォルト タイム ゾーンとして太平洋標準時刻 (PST) を採用します。

この変数の存在についてはあまり広く知られていないため、ほとんどの Windows PC ではこの変数設定が行われていません (つまり 16-bit Windows API は PC を PST タイムゾーンにあるものとして認識します)。これは 32-bit Windows オペレーティング システムで稼動する 16-bit プログラムにも適用されます。32-bit プログラムはすべて (32-bit ChemStation リビジョン B.0x.0x など) 32-bit Windows API 機能を利用します。この環境においては、Windows は [**コントロールパネル**] で設定可能なタイムゾーン情報を利用します。

TZ 変数とは反対に、多くの場合 32-bit 環境でのタイムゾーンは正しく設定されます。これは最初のスタートアップ時に Windows がユーザーに対して設定の確認を行うためです。よって通常の PC (PST タイムゾーン以外) では、16-bit の Windows 環境で設定された、32-bit 環境とは異なるタイムゾーンが利用されています。その結果 32-bit Windows プログラムは、作成時に利用されたものとは異なるタイムゾーンで UTC タイムスタンプを採用します。これにより正しい現地時間と PST (デフォルトとして 16-bit Windows 環境で使用) のデルタによる差異が発生します。例えば、CET (欧州中央時間) タイム ゾーンのタイムスタンプが 9 時間異なるとします。

ChemStation では、以下のタイムスタンプが対象となります：データファイルの［**注入時間**］、メソッドの［**最終変更**］時間および［**最終更新**］時間。16-bit ChemStation で作成されたメソッドおよびデータファイルを 32-bit ChemStation にインポートする場合、16-bit ChemStation 使用時に Windows システムで TZ 変数が指定されていないと、次のようなタイムスタンプの問題が生じます。16-bit ChemStation と 32-bit ChemStation で表示されるタイムスタンプが、実際の時間と PST の差異の分だけ異なるのです。

例：

- フランス (GMT + 1 時間)：
  - 注入時間 ChemStation A.xx.xx :11.00
  - 注入時間 ChemStation B.0x.0x :20.00 (= 11.00 時間 + 9 時間) へシフト
- 中国 (北京) (GMT + 8 時間)：
  - 注入時間 ChemStation A.xx.xx : 11.00
  - 注入時間 ChemStation B.0x.0x : 翌日へシフト、03.00 (= 11.00 時間 +16 時間)

注記

ChemStation PLUS アプリケーションは TZ 変数を利用して現地時間を算出し、レポートに採用します。よって ChemStation PLUS システムは、タイムスタンプにおける差異が発生しません。

8 定量メソッドへのアップグレードの影響 (リビジョン A.xx.xx からのアップグレードに関連した内容のみ)

一般的側面 127
積分アルゴリズムリビジョン A.xx.xx ChemStation 129
標準インテグレータからのアップグレード 132
検証済みシステムへの影響 - 「標準インテグレータ」に基づく 133
「標準インテグレータ」に基づく A.xx.xx からの既存のメソッドを用いて作業を続けます。 134
積分値に関連する製品仕様を使用する場合 135
再解析、データ互換のために ChemStation リビジョン A.xx.xx をアップロード 135
拡張インテグレータからのアップグレード 137
改良されたピーク開始および終了時間位置決定の例 139
検証済みシステムへの影響 - 「拡張インテグレータ」に基づく 151
「拡張インテグレータ」に基づく A.xx.xx からの既存のメソッドを用いて作業を続けます。 151
積分値に関連する製品仕様を使用する場合 152
再解析、データ互換のために ChemStation リビジョン A.xx.xx をアップロード 152
拡張ベースラインを用いたインテグレータからのアップグレード 154
検証済みシステムへの影響 - 「拡張ベースライン」を持つ「拡張インテグレータ」に基づく 156

8 定量メソッドへのアップグレードの影響 (リビジョン A.xx.xx からのアップグレードに関連した内容のみ)

LC ChemStation で RC.NET ドライバの使用がマクロソリューションに与える影響

「拡張ベースラインを持つ拡張インテグレータ」に基づく A.xx.xx からの既存のメソッドを用いて作業を続ける 157
積分値に関連する製品仕様を使用する場合 157
ChemStation リビジョン A.xx.xx データをアップロードする必要があります。 158

この章には、リビジョン A.xx.xx ChemStation (G2070AA、G2170AA など) でさまざまなインテグレータを使用するメソッドでの違いと影響の概要がまとめられています。標準インテグレータ、拡張積分、拡張ベースラインオプションのある拡張積分。

一般的側面

32 ビットソフトウェアアーキテクチャに移行することで、Agilent は親しい拡張「ChemStation インテグレータ」の機能を改善しました。積分精度のほか、新しい積分イベントの改善を生かすために、弊社は改良型 Chem32 インテグレータに取り組みました。ChemStation リビジョン B.0x.0x では、一般的に積分計算および結果の精度が改善され、結果に多少の差ができます。リビジョン A.xx.xx ChemStation で使用される「標準インテグレータ」および「拡張ベースラインを使用した拡張インテグレータ」は、リビジョン B.0x.0x ChemStation では使用できませんのでご注意ください。

ChemStation リビジョン B.0x.0x の Chem32 インテグレータには多数の拡張が含まれ、今や Agilent ネットワークデータシステム (NDS) 製品ファミリ全体にわたって使用されます。Chem32 インテグレータにより、ピーク開始 / 終了位置時間の決定に対する高精度に基づいて拡張された耐久性と使い易さ、そしてベースライン構成のための追加パラメータが提供されます。Agilent はお客様のご要望にお応えして、すべてのシグナルに使用される新しい積分イベントを実行しました。

新しい積分イベントにより、あなたの積分タスクの実行に高い柔軟性が提供されます。新しい「ベースライン補正」積分イベントにより、ノイズが多いかドリフトしているベースラインの取扱が容易になります。新しい積分イベント（『128 ページ 図 18』に示されている）により、テーリングピークまたはフロントピークのスキミングモードのほかこのモードが適用される場合の仕様も選択できます。Chem32 インテグレータにより、さらに効率的で速い積分とメソッド作成、および積分結果の改善された精度が提供されます。

グラフィックユーザーインタフェースの主要要素には変更のないままです。シグナル固有積分イベントのほかタイム積分イベントの使用および選択も変更のないままです。新しい積分イベントはシグナル固有積分イベントの最上部でアクセス可能です。『128 ページ 図 18』を参照してください。

新しい積分イベント

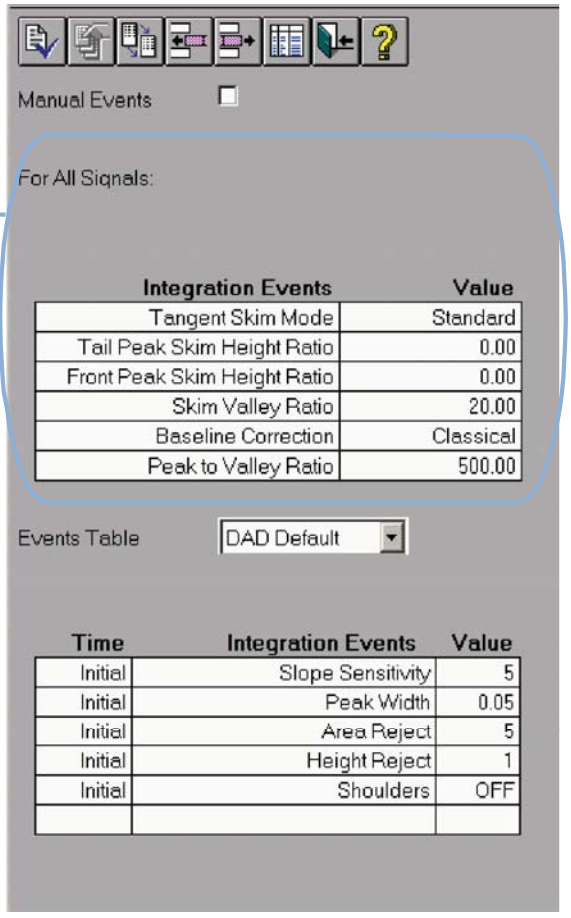


図 18 新しい積分イベント用のデフォルト値

ChemStation リビジョン B.0x.0x の新しい積分イベントは以下の通りです。

- タンジェントスキムモード
- テールピークスキム高さ比
- フロントピークスキム高さ比
- スキム谷比
- ベースライン補正

- ピーク谷比

「初期」積分イベントをシグナル固有に定義できる一方、これらのパラメータは読み込まれたすべてのシグナルに対して標準です。

これらの新しい積分イベントの用途および機能は、リビジョン B.0x.0x『ChemStation の概要』マニュアルのほか、オンラインヘルプでも詳細に説明されています。

デフォルトメソッド DEF_xx.M またはリビジョン A.xx.xx ChemStation からのメソッドを読み込む場合、新しい Chem32 積分イベントがデフォルト値に設定されます。新しい積分イベント用のデフォルト値は、『128 ページ 図 18』に示しています。

新しい Chem32 積分イベント用のデフォルト値の割り当ては、ChemStation リビジョン A.xx.xx システム由来のいずれの既存の積分イベントも干渉しません。新しい積分イベント用にデフォルト値が使用される場合、Chem32 インテグレータアルゴリズムはリビジョン A.xx.xx ChemStation からの「拡張インテグレータ」に対して同様の方法を示します。

新しい Chem32 積分イベントは、リビジョン B.0x.0x ChemStation に読み込まれた リビジョン A.xx.xx メソッドに自動的に適用されます。リビジョン A.xx.xx メソッドが初回に保存される時に、新しい積分イベントはリビジョン B.0x.0x メソッドの一部として保存されます。

積分アルゴリズムリビジョン A.xx.xx ChemStation

ChemStation リビジョン A.xx.xx で提供される積分アルゴリズムは以下の内容です。

- 標準インテグレータ
- 拡張インテグレータ
- 拡張ベースラインオプションを使用した拡張インテグレータ

『130 ページ 図　表 22』には様々なインテグレータの積分イベントテーブルが示されています。以下の節では、異なる開始ポイントに応じた積分メソッドの更新中の変化を説明します。

注記

標準インテグレータは、リビジョン B.0x.0x ChemStation では使用できません。

拡張インテグレータの改良版は、ChemStation リビジョン B.0x.0x では使用できません。

拡張インテグレータの**拡張ベースラインオプション** は、リビジョン B.0x.0x ChemStation では使用できません。代わりのインテグレータにより、新しいベースライン補正機能がさらに拡張されます。

表 22 Agilent ChemStation リビジョン A.xx.xx インテグレータ

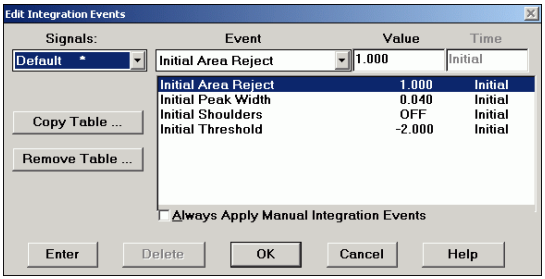
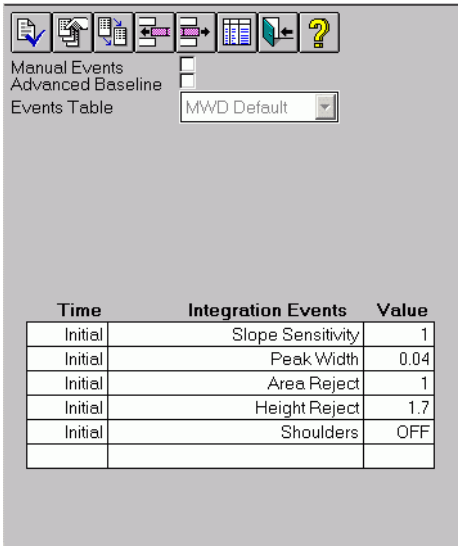
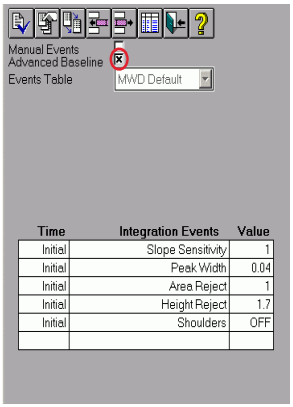
説明	以降のリビジョンで使用可能	スクリーンショット例
標準インテグレータ 『「標準インテグレータからのアップグレード」 132 ページ 図』を参照してください	リビジョン A.02.xx (1993 年)	
拡張インテグレータ **デフォルトインテグレータ** 『「拡張インテグレータからのアップグレード」 137 ページ 図』を参照してください	リビジョン A.04.01 (1996 年) A.05.01 (1997 年)	

表 22 Agilent ChemStation リビジョン A.xx.xx インテグレータ

説明	以降のリビジョンで使用可能	スクリーンショット例
拡張ベースラインオプションを使用した**拡張インテグレータ** 『「拡張ベースラインを用いたインテグレータからのアップグレード」154 ページ 図』を参照してください	リビジョン A.06.01 (1998 年)	

標準インテグレータからのアップグレード

「標準インテグレータ」を含むリビジョン A.xx.xx メソッドがリビジョン B.0x.0x システムに読み込まれる場合、下記の『132 ページ 図 19』に記載のダイアログが表示されます。古い積分設定を含むメソッドが読み込まれ、リビジョン B.0x.0x システムで使用できるようにするために自動的に更新されることが、このダイアログにより知らされます。

図 19 メソッドの自動更新

OK を選択して続行します。メソッドは自動的に更新されます。

注記

メソッドを保存するだけで、新しい積分イベントは保存されるます。オリジナルの 16 ビットメソッドのコピーを保持したい場合、新しい名前でメソッドを保存してください。

オリジナルのメソッドが保存され、ChemStation リビジョン A.xx.xx と下位互換性があります。リビジョン B.0x.0x システムで 16 ビットメソッドを保存する場合、名前を変更するよう常に促されます。

Chem32 インテグレータは、リビジョン A.xx.xx ChemStation からの「標準インテグレータ」の積分イベントを使用しません。「初期スレッショルド」などのわずかに異なる機能を持つ積分イベントが使用される「標準インテグレータ」は、2 の乗数で表されるベースライン上の高さを使用します。リビジョン B.0x.0x の Chem32 インテグレータは、「スロープ感度」イベントを使用して、ピークリテンションに対するスロープの変化を検出します。**[スロープ感度]** 値は均等目盛上で変化します。

Chem32 インテグレータは、すべての新しい積分イベントに対してデフォルト値を使用します。積分イベント値は、リビジョン A.xx.xx の**「標準インテグレータ」**からの以前使用した値とは相関性がありません（『133 ペー

ジ 図　表 23』を参照)。リビジョン A.xx.xx の**「標準インテグレータ」**を使用してアップロードされたメソッドは、それに応じて積分パラメータを再調整する必要があります。

表 23　標準インテグレータに基づく B.0x.0x の積分パラメータ

積分イベント 標準インテグレータ A.xx.xx	値（デフォルト）	積分イベント 拡張インテグレータ A.xx.xx Chem32 インテグレータ B.0x.0x	値（デフォルト）
初期スレッショルド	– 2	スロープ感度	5
初期ピーク幅	0.04	ピーク幅	0.05
初期面積リジェクト	1.00	面積リジェクト	5
初期ショルダ	オフ	ショルダ	オフ
		高さリジェクト	1

検証済みシステムへの影響 – 「標準インテグレータ」に基づく

Chem32 インテグレータは、以前のバージョンの ChemStation ソフトウェアで得られた積分結果に影響を及ぼします。**標準インテグレータ**に基づいたメソッドの積分部分を再加工する必要があります。

Chem32 インテグレータに対して、すべての積分イベントを再調整する必要があります。Chem32 インテグレータで使用される更新された ChemStation リビジョン . A.xx.xx メソッドは以下範囲で影響を受けることに注意してください。

結果：	アマウント、キャリブレーション面積、レスポンスファクタ、など。
ユーザー必要事項仕様：	合格基準
機能仕様：	S/N、ピーク対称、など。

Chem32 インテグレータを変更すると、以下のシナリオに影響を及ぼします。

- リビジョン B.0x.0x のアップロードされたリビジョン A.xx.xx を用いて作業します。
- 積分値に関連する定義済み製品仕様を使用します。
- 再解析、異なる ChemStation リビジョン間でのデータ交換、監査目的、または他の理由のために、ChemStation リビジョン A.xx.xx データをアップロードする必要があります。

「標準インテグレータ」に基づく A.xx.xx からの既存のメソッドを用いて作業を続けます。

リビジョン B.0x.0x のメソッドをアップロードして積分イベントを開くと、すべての積分イベントはデフォルト値に設定されます。

Chem32 インテグレータデフォルト値は、『128 ページ 図 18』に示しています。それに応じて、積分イベントを再定義する必要があります。Chem32 で使用可能な新しい積分イベントを使用して、積分の改良の利点を生かすことを Agilent はお勧めします。

インテグレータ設定の最適化後、リビジョン B.0x.0x で更新された検量線を得るため、リキャリブレーション / 置換機能で既存のキャリブレーションテーブルを更新する必要があります。更新されたキャリブレーションテーブルには、あなたの更新された積分設定に対応する新しく計算された面積が含まれます。

あなたのメソッドのそれぞれに対して、リビジョン A.xx.xx のオリジナルの検量線とリビジョン B.0x.0x の更新された検量線の相違を評価する必要があります。

メソッドを部分的に再バリデーションする必要があるかを評価する必要があります。データ取込パラメータは変更せず、既存のデータセットに対して再バリデーションを行います。

積分値に関連する製品仕様を使用する場合

更新された積分設定により、以下の結果に影響が及ぶ可能性があります。面積、高さ、ピーク幅、ピーク対称、ピーク開始および終了時間など。あなたの製品仕様がこれらの結果のいずれかに基づく場合、それに応じて積分イベントを更新する必要があります。

メソッドを部分的に再バリデーションする必要があるかを評価する必要があります。データ取込パラメータは変更せず、既存のデータセットに対し再バリデーションを行います。

再解析、データ互換のために ChemStation リビジョン A.xx.xx をアップロード

再解析や異なる ChemStation リビジョン間でのデータ互換、監査目的、または他の理由のために、ChemStation リビジョン A.xx.xx データをアップロードする必要があります。

異なるリビジョンの ChemStation システム間でのデータ互換

リビジョン A.xx.xx とリビジョン B.0x.0x などの異なる ChemStation リビジョンを使用したシステムからの結果を比較するために、各インテグレータの違いを考慮して適切に文書化できるようにインテグレータと使用した積分設定を記述しておく必要があります。

監査目的、検査などのためのリビジョン A.xx.xx ChemStation データの復元

A.xx.xx の結果を復元または再現する必要がある規制下の場合、リビジョン B.0x.0x のデータファイルを再解析する必要がある場合があります。

リビジョン B.0x.0x の Chem32 インテグレータにより、異なる積分結果が生じます。しかしながら、Chem32 インテグレータにより、同等のベースライン構成が得られる積分イベントを指定できるようになります。新しいベースライン構成がオリジナルのベースライン構成と視覚的に一致していれば、結果の違いは分析精度から見えても非常に小さくなります。ベースライン構成が一致せず、Chem32 積分イベントを使用して達成できない場合、マニュアルでのベースラインの構成を考慮することが必要です。

8 定量メソッドへのアップグレードの影響 (リビジョン A.xx.xx からのアップグレードに関連した内容のみ)

標準インテグレータからのアップグレード

ChemStation Plus ユーザーにより、ChemStore データベースからのマニュアルベースライン再構成のためのピーク開始および終了時間を検索できます。

注記

この「アップグレードガイド」は規制当局の監査目的のために重要で、監査員が「標準インテグレータ」を持つメソッドを使用して ChemStation リビジョン A.xx.xx で作成されたデータの再解析を要求する場合に、監査のために使用できるようにすることが必要です。

拡張インテグレータからのアップグレード

リビジョン A.xx.xx の「拡張インテグレータ」をリビジョン B.0x.0x システムに読み込ませると、積分イベントダイアログに追加テーブルが作成されます。このテーブルには、ChemStation リビジョン B.01.01 に導入された新しい積分イベントが含まれます。

メソッドを保存すると、メソッドは 32 ビット構造に更新されます。

一旦メソッドがリビジョン B.0x.0x に保存されると、ChemStation の以前のリビジョンではもう使用できません。

注記

メソッドを保存するだけで、新しい積分イベントは保存されるます。オリジナルの 16 ビットメソッドのコピーを保持する場合、新しい名前でメソッドを保存します（『137 ページ 図 20』を参照してください）。

オリジナルのメソッドが保存され、ChemStation リビジョン A.xx.xx と下位互換性があります。リビジョン B.0x.0x システムで 16 ビットメソッドを保存する場合、名前を変更するよう常に促されます。

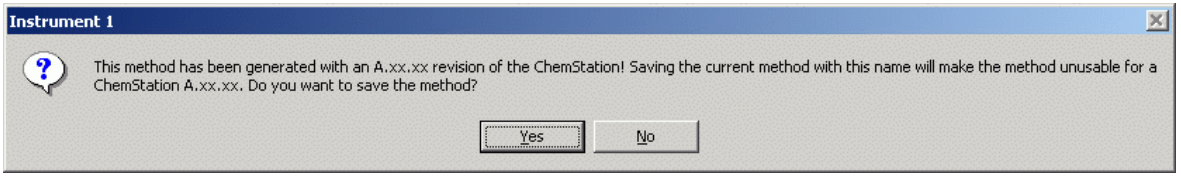


図 20　名前変更のプロンプト

オリジナルメソッドに存在する指定シグナル固有積分イベント（初期およびタイム）のすべては、リビジョン B.0x.0x と共に使用するアップグレードの後、変更のないままです。新しい Chem32 **すべてのシグナル**用積分イベント用のデフォルト値の割り当ては、ChemStation リビジョン A.xx.xx システム由来のいずれの既存の積分イベントも干渉しません。新しい Chem32 積分イベントは、リビジョン B.0x.0x ChemStation に読み込まれた リビジョン A.xx.xx メソッドに自動的に適用されます。リビジョン A.xx.xx メソッドがリビジョン B.0x.0x ChemStation で初めて保存されると直ぐに、新しい積分イベントはリビジョン B.0x.0x の一部として保存されます。

新しい積分イベント用のデフォルト値は、『138 ページ 図 21』で図解されています。

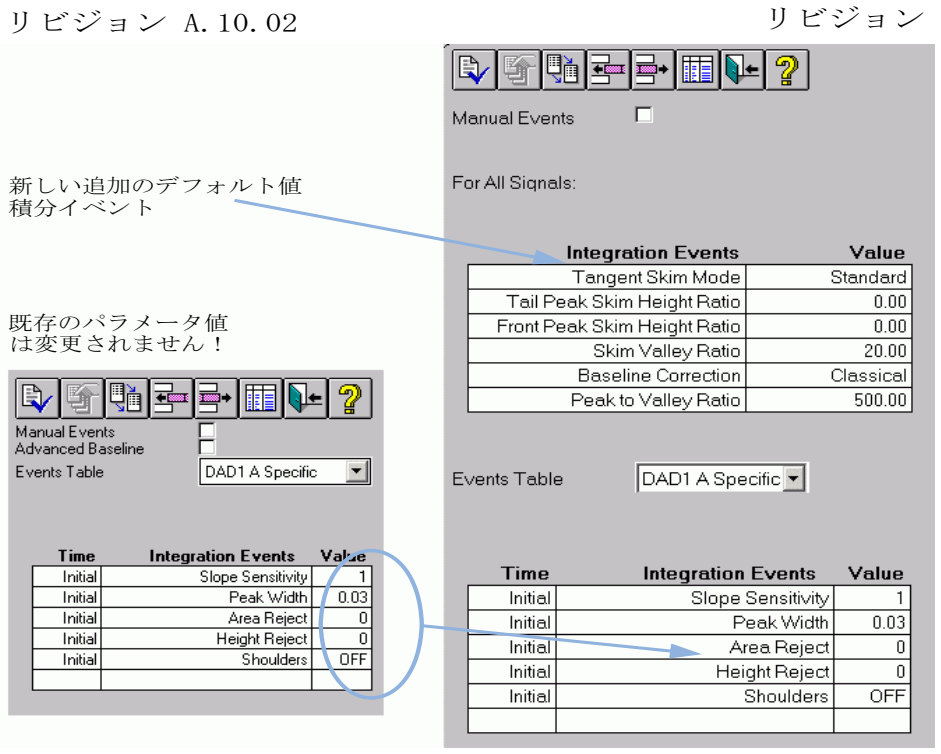


図 21 リビジョン A.10.02 およびリビジョン B.0x.0x のパラメータ値

注記

リビジョン B.0x.0x ChemStation システムに初めてメソッドが読み込まれる時、新しい積分イベントがデフォルト値に自動的に設定されます。デフォルト値が割り当てらた場合は、メソッド変更フラグは設定されません。

ピーク開始および終了時間の精度の改善により、高さ、ピーク幅などの積分結果に小さな変化が生じることがあります。積分結果が変更されると、S/N、ピーク対称度などのこれらの積分結果を使用して計算された値に変化が生じます。小さな面積ピーク、シャープで幅の狭いピーク、および非対称（非ガウス形状）ピークに対して、最も大きな変化が予想されます。小

さくてシャープな形状のピークでは、データポイントが少ないため 1 つのデータポイントの変化が大きく影響します。特にノイズが大きい形状のピークは、ピーク形状の予想より変化が大きくなる可能性があります。

以下の節では、デモデータに基づき起こり得る結果の相違を実例を挙げて説明します。積分の複雑性（タイムイベントの使用など）およびベースラインノイズ、ピーク形状、ピーク分解能などのクロマトグラムの個別特性に応じて、積分結果への影響が異なる可能性があります。

起こり得る積分の影響を強調するためにこの資料で使用されるデータ例が、必ずしもあなた固有のデータに反映されるとは限りません。この資料の範囲内で、起こり得るシナリオのすべてを説明することはできません。

改良されたピーク開始および終了時間位置決定の例

ChemStation A.xx.xx メソッドをリビジョン B.0x.0x ChemStation へアップデートした後の異なる積分結果を図解するために、ChemStation リビジョン A.10.02 と B.0x.0x の両方の同一積分イベントを使用してクロマトグラムを積分します。この比較の結果は、クロマトグラムに従って表にリストアップされます。レポートプリンアウトも添付します。比較は、ピーク面積、ピーク高さ、ピーク幅、ピーク開始時間、ピーク終了時間、およびアマウント結果に基づいています。

クロマトグラム例 No. 1

システム比較に使用したデータ / 設定

積分結果を比較するために、リビジョン A.10.02 およびリビジョン B.01.01 ChemStation での以下のデータファイルの面積パーセント計算を行います。

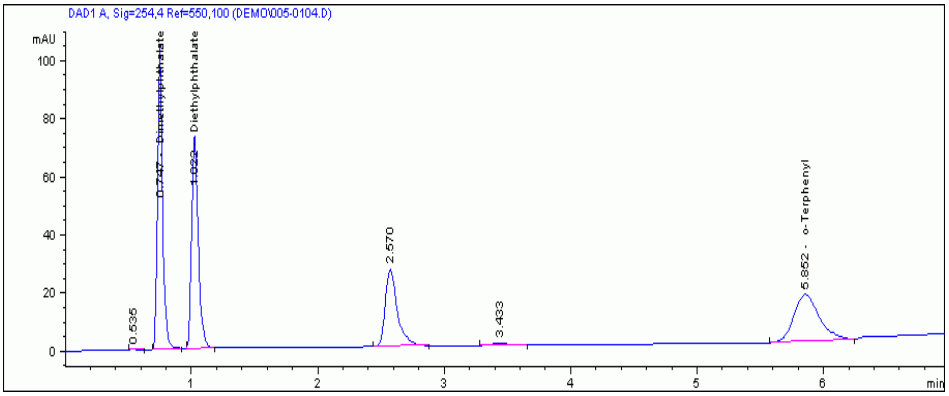


図 22 ChemStation A.10.02 クロマトグラム例 No 1

表 24 例 No.1 に使用されるデータファイル

使用されたレポート	データファイル	シグナル説明
面積 % 計算	005-0104.D	シグナル A、254,4 リファレンス 550、100

積分設定： メソッドは、以下の積分イベント値の**拡張インテグレータ**を使用して設定されました。

スロープ感度	3
ピーク幅	0.04
面積リジェクト	0
高さリジェクト	0
ショルダ	オフ

実行のステップ：

1 リビジョン A.10.02:

サンプルファイルを処理し、積分結果と面積パーセントレポートを作成します。(面積パーセントレポートに関しては、付録の『179 ページ 図 34』を参照してください)。

2 リビジョン B.01.01:

リビジョン B.01.01 ChemStation 内のアップロードされたメソッドは、同じサンプルファイルを再解析するのに使用され、面積パーセントレポートを作成します。(面積パーセントレポートに関しては、付録の『180 ページ 図 35』を参照してください)。

結果比較： レポートされた積分結果ピークの比較により、ほぼすべてのピークの相違が示されます。これらのピークの面積計算は、改良されたピーク開始および終了位置決定により異なります。この場合、X の目盛り上の開始および終了時間の相違は、表示された桁数に対しては存在しません。開始および終了決定の Y 位置はレポートに印刷されず、登録エントリとして使用可能です。開始および終了時間位置の決定の変更は、ベースライン構成に影響を及ぼします。そのため、すべてのインテグレータ結果が影響を受ける可能性があります。

表 25　データファイル 005-0104.D 例 No. 1 の比較の積分結果

	A.10.02	B.01.01	相違、絶対値	相違 相対値 /%	名前
リテンションタイム	0.5347561240	0.5347561240	0.0000000000	0.000	< 未知 >
	0.7465666533	0.7465666533	0.0000000000	0.000	フタル酸ジメチル
	1.0216099024	1.0216099024	0.0000000000	0.000	フタル酸ジエチル
	2.5699408054	2.5699408054	0.0000000000	0.000	< 未知 >
	3.4325516224	3.4325516224	0.0000000000	0.000	< 未知 >
	5.8524289131	5.8524289131	0.0000000000	0.000	o- テルフェニル
面積	0.2853316367	0.2853193283	0.0000123084	0.004	< 未知 >
	294.8515014648	294.8515014648	0.0000000000	0.000	フタル酸ジメチル
	261.4009399414	261.4132385254	0.0122985840	0.005	フタル酸ジエチル
	175.7781066895	175.8833465576	0.1052398681	0.060	< 未知 >
	5.4511561394	5.4511113167	0.0000448227	0.001	< 未知 >
	229.3132476807	229.3127593994	0.0004882813	0.000	o- テルフェニル

表 25 データファイル 005-0104.D 例 No. 1 の比較の積分結果

	A.10.02	B.01.01	相違、絶対値	相違 相対値 /%	名前
高さ	0.3549563885	0.3549563885	0.0000000000	0.000	< 未知 >
	104.6963195801	104.6963195801	0.0000000000	0.000	フタル酸ジメチル
	75.4323272705	75.4323272705	0.0000000000	0.000	
	26.6097583771	26.6126747131	0.0029163360	0.011	フタル酸ジエチル
	0.6711332798	0.6711332798	0.0000000000	0.000	
	16.2621154785	16.2621154785	0.0000000000	0.000	< 未知 >
					< 未知 >
					o- テルフェニル
ピーク幅	0.0213782471	0.0213778429	0.0000004042	0.002	< 未知 >
	0.0448563062	0.0448563062	0.0000000000	0.000	フタル酸ジメチル
	0.0524293184	0.0524312221	0.0000019037	0.004	
	0.1010673866	0.1011050791	0.0000376925	0.037	フタル酸ジエチル
	0.1227603480	0.1227595583	0.0000007897	0.001	
	0.2125124931	0.2125121504	0.0000003427	0.000	< 未知 >
					< 未知 >
					o- テルフェニル
開始時間	0.5080894828	0.5080894828	0.0000000000	0.000	< 未知 >
	0.6945833564	0.6945833564	0.0000000000	0.000	フタル酸ジメチル
	0.9605301023	0.9605301023	0.0000000000	0.000	
	2.4412500858	2.4412500858	0.0000000000	0.000	フタル酸ジエチル
	3.2827787399	3.2827787399	0.0000000000	0.000	
	5.5745835304	5.5745835304	0.0000000000	0.000	< 未知 >
					< 未知 >
					o- テルフェニル

表 25　データファイル 005-0104.D 例 No. 1 の比較の積分結果

	A.10.02	B.01.01	相違、絶対値	相違 相対値 /%	名前
終了時間	0.6279166937	0.6279166937	0.0000000000	0.000	< 未知 >
	0.9212499857	0.9212499857	0.0000000000	0.000	フタル酸ジメチル
	1.1879166365	1.1879166365	0.0000000000	0.000	
	2.8812499046	2.8812499046	0.0000000000	0.000	フタル酸ジエチル
	3.6545832157	3.6545832157	0.0000000000	0.000	
	6.2448053360	6.2448053360	0.0000000000	0.000	< 未知 >
					< 未知 >
					o- テルフェニル
面積パーセント	0.0295044415	0.0294996001	0.0000048414	0.016	< 未知 >
	30.4888339137	30.4851459574	0.0036879563	0.012	フタル酸ジメチル
	27.0299109999	27.0279130072	0.0019979927	0.007	
	18.1761648623	18.1848471676	0.0086823053	0.048	フタル酸ジエチル
	0.5636715206	0.5635987041	0.0000728165	0.013	
	23.7119142620	23.7089955637	0.0029186983	0.012	< 未知 >
	967.08028	967.19728			< 未知 >
合計					o- テルフェニル

クロマトグラム例 No. 2

システム比較に使用したデータ / 設定

積分結果および計算された値（アマウント）を比較するために、リビジョン A.10.02 ChemStation の以下の 3 つのデータファイルによる、マルチレベルキャリブレーションを使用します。

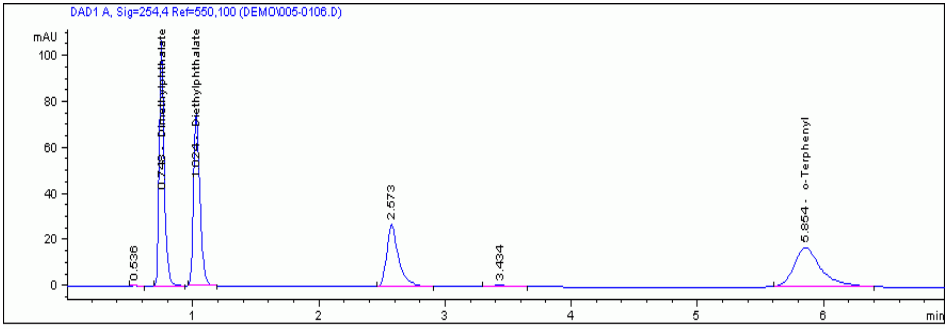


図 23　ChemStation A.10.02 クロマトグラム例 No 2 サンプルファイル

表 26 例 No.2 に使用されるデータファイル

使用目的	データファイル	シグナル説明	アマウント
キャリブレーションデータ、レベル 1	005-0101.D	シグナル A、254,4 リファレンス 550、100	3
キャリブレーションデータ、レベル 2	006-0201.D	シグナル A、254,4 リファレンス 550、100	5
キャリブレーションデータ、レベル 3	007-0301.D	シグナル A、254,4 リファレンス 550、100	7
サンプルデータ	005-0106.D	シグナル A、254,4 リファレンス 550、100	計算用

積分設定： メソッドは、以下の積分イベント値の**拡張インテグレータ**を使用して設定されました。

スロープ感度	3
ピーク幅	0.04
面積リジェクト	0
高さリジェクト	0
ショルダ	オフ

実行のステップ：

1 リビジョン A.10.02

3 つのレベルのキャリブレーションテーブルが作成されました。結果を取得するためにサンプルファイルが処理され、そして ESTD レポートが作成されました。(付録の『181 ページ 図 36』を参照してください)。

2 リビジョン B.01.01

リビジョン B.01.01 ChemStation でアップロードされたメソッドは、各キャリブレーションレベルに対して［**置換**］オプションを使用して再キャリブレーションされました。同じサンプルファイルを使用して結果が再解析され、ESTD レポートが作成されます (付録の『182 ページ 図 37』を参照してください)。

結果比較： キャリブレーションピークに基づきレポートされたアマウントの比較により、アマウント結果にいくつかの相違が示されます（『146 ページ 図　表 28』を参照）。

リビジョン B.01.01 のメソッドの再キャリブレーション後、キャリブレーションテーブルには、更新された面積値が表示されます。リビジョン A.10.02 からのオリジナルキャリブレーションと比較します。『145 ページ 図　表 27』を参照してください。キャリブレーションレベル面積は変わるため、再解析されたキャリブレーションデータで更新する必要があります。

3 つのキャリブレーションピークの面積が A.10.02 および B.01.01 で同じになる特別な場合には、データファイルが例として使用されました。この例は、検量線に使用される更新されたキャリブレーション面積の影響を示します。

表 27　キャリブレーションテーブルデータ A.10.02 システム / 再キャリブレーションされた B.01.01 システムの比較

レベル	化合物	面積 A.10.02	面積 B.01.01	相違、絶対値	相違 相対値 /%
レベル 1	フタル酸ジメチル	294.8071899414	294.9114379883	0.1042480469	0.0354
	フタル酸ジエチル	260.7143249512	260.9624023438	0.2480773926	0.0952
005-0101.d	o-テルフェニル	251.7360076904	251.7360076904	0.0000000000	0.0000
レベル 2	フタル酸ジメチル	458.7709655762	458.7012634277	0.0697021484	0.0152
	フタル酸ジエチル	409.6070556641	409.3640441895	0.2430114746	0.0593
006-0201.d	o-テルフェニル	394.7962341309	394.5599365234	0.2362976074	0.0599
レベル 3	フタル酸ジメチル	645.0082397461	644.9074096680	0.1008300781	0.0156
	フタル酸ジエチル	577.7369995117	577.3869018555	0.3500976563	0.0606
007-0301.d	o-テルフェニル	557.1237182617	557.1237182617	0.0000000000	0.0000

表 28 リキャリブレーション後のデータファイル 005-0106.D の比較に対する積分結果

	A.10.02	B.01.01	相違、絶対値	相違 相対値 /%	化合物
リテンションタイム	0.748061 1.023835 5.853765	0.7480610609 1.0238345861 5.8537645340	0.000000 0.000000 0.000000	0.000000 0.000000 0.000000	フタル酸ジメチル フタル酸ジエチル o- テルフェニル
面積	300.7270507813 266.6829528809 256.1013793945	300.7270508 266.6829529 256.1013794	0.000000 0.000000 0.000000	0.000000 0.000000 0.000000	フタル酸ジメチル フタル酸ジエチル o- テルフェニル
高さ	106.9831390381 77.3352508545 17.0476074219	106.9831390381 77.3352508545 17.0476074219	0.000000 0.000000 0.000000	0.000000 0.000000 0.000000	フタル酸ジメチル フタル酸ジエチル o- テルフェニル
アマウント	3.2155806766 3.1973308873 3.1833136562	3.21565412 0 3.197973012 3.183981658	0.0000734 0.0006421 0.0006680	0.0023 0.0201 0.0210	フタル酸ジメチル フタル酸ジエチル o- テルフェニル
合計	9.59623	9.59761	0.00138	0.0144	

クロマトグラム例 No. 3

この例では、谷を含む小さな面積のピークに対するピーク開始および終了時間の検出精度が改善されたことが示されます。クロマトグラム例 No. 2 では、0.372 分と 0.516 分のピークの間の谷の位置が、リビジョン A.10.02 およびリビジョン B.01.01 では違うように測定されます。『147 ページ 図 24』および『147 ページ 図 25』に示された通り、Chem32 インテグレータにより正確な谷の決定ができるようにします。システムには、谷をはさんだ各ピークに対して異なる面積が表示されます『147 ページ 図 表 29』。0.372 分のピークに対する絶対面積の相違は 0.052122 面積カウントとして計算され、0.5016 分のピークに対する絶対面積の相違は 0.051955 面積カウントとして計算されます。

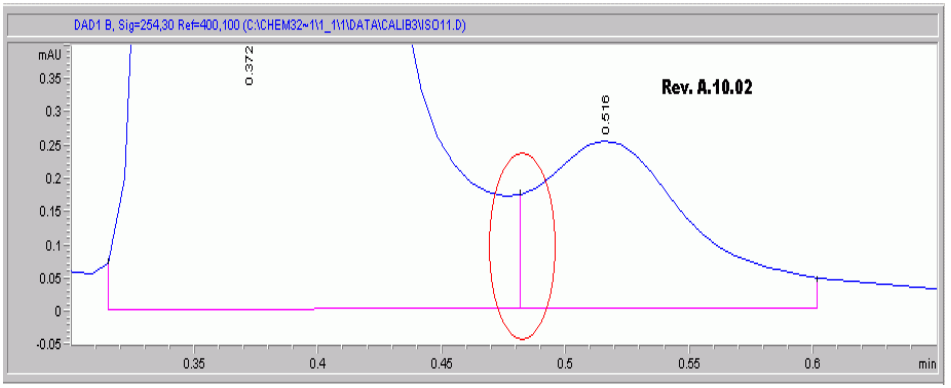


図 24　　ChemStation A.10.02 クロマトグラム例 No 3

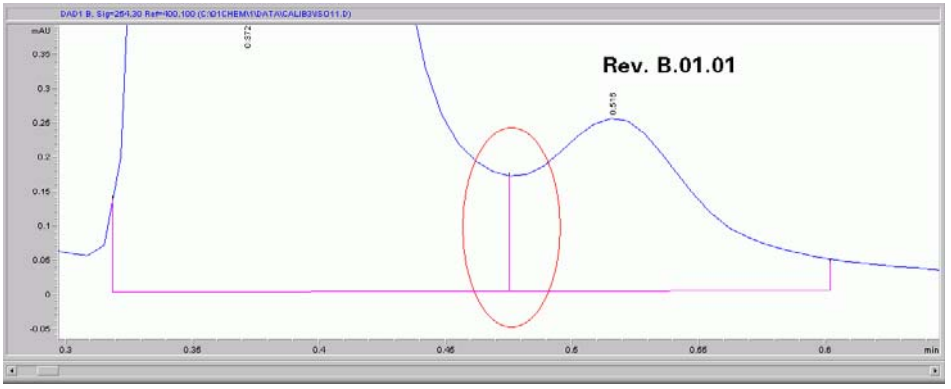


図 25　　ChemStation B.01.01 クロマトグラム例 No 3

表 29　　データ例 No.3 の積分結果

	ピークの時間	A.10.02	B.01.01	相違、絶対値	相違 相対値 /%
面積	0.372 0.516	54.9091682434 1.0940805674	54.8570480347 1.1460355520	0.0521202087 0.0519549847	0.095 4.749
高さ	0.372 0.516	18.7451038361 0.2533660233	18.7451038361 0.2533660233	0.000000000 0.000000000	0.000 0.000
ピーク幅	0.372 0.516	0.0461746305 0.0623787865	0.0461421907 0.0647711381	0.0000324398 0.0023923516	0.070 3.835

表 29 データ例 No. 3 の積分結果

	ピークの時間	A. 10. 02	B. 01. 01	相違、絶対値	相違 相対値 /%
開始時間	0. 372 0. 516	0. 3151666522 0. 4818333387	0. 3151666522 0. 4767456055	0. 000000000 0. 0050877333	0. 000 1. 056
終了時間	0. 372 0. 516	0. 4818333387 0. 6018333435	0. 4767456055 0. 6018333435	0. 0050877333 0. 000000000	1. 056 0. 000

クロマトグラム例 No. 4

以下の例では、隣り合うピーク間のピーク開始および終了時間の相違の影響が示されます。起こり得る結果の相違を強調する複数のファクタが含まれているため、極端な場合にこの例を確認できます。

この例では、次のファクタが含まれます

- 面積値 2. 06 の小さいピーク
- ベースラインの落ち込みのあるピーク： ポジティブピークおよびネガティブピーク部分の間の相違として、合計面積が計算されます。ベースライン構成の変更により、単純なポジティブピークへの影響が 2 倍になります。
- この例で使用される積分イベントは、ベースラインの落ち込みのため、このピークに対して満足のいくベースラインを構成することができません。一般的に、精度が低くなります。

クロマトグラム例 No. 4 では、1. 29 分のピークは 0. 00584 面積カウントの小さな絶対面積相違を示します。しかしながら、小さな面積のために、相対相違は 0. 284% と計算されます。『150 ページ 図 表 30』を参照してください。

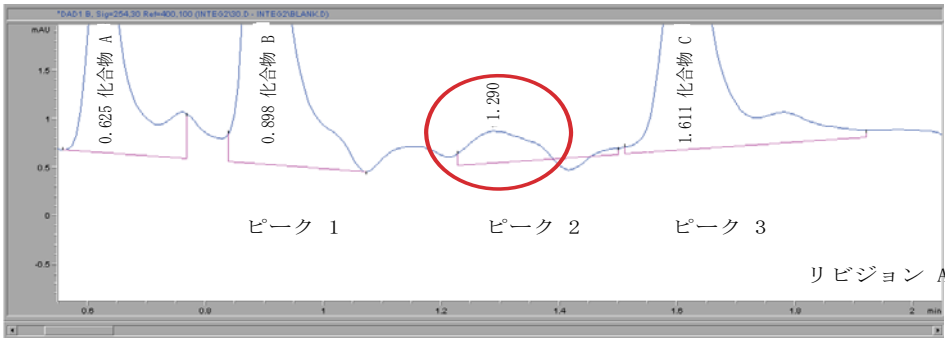


図 26　ChemStation A.10.02: クロマトグラム例 4

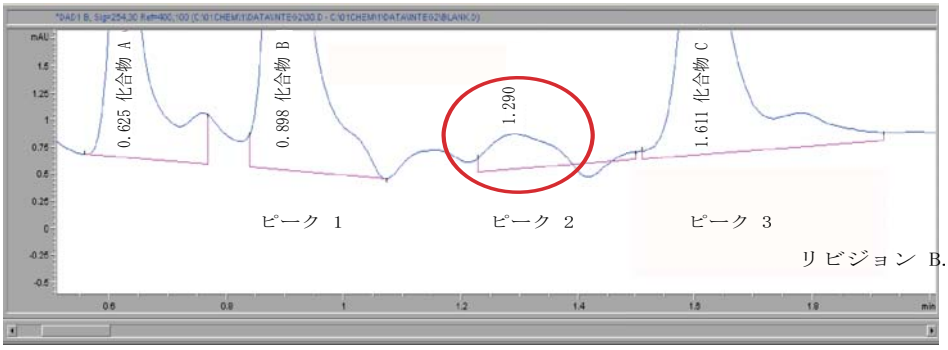


図 27　ChemStation B.01.01: クロマトグラム例 4

対象ピークのピーク開始および終了時間を観察すると、どちらの値も ChemStation のリビジョン間での相違を示さず、視認できる相違も観察されません（『149 ページ 図 26』と『149 ページ 図 27』を参照）。ベースライン構成が異なる可能性があるため、現在のピークのほか、以前および次のピークのピーク開始および終了時間も考慮する必要があります。『150 ページ 図　表 30』、『150 ページ 図　表 31』および『150 ページ 図　表 32』の値を注意深く観察することで、以前のピークのピーク終了時間が異なることを確認できます。これにより異なるベースライン構成および 0.00058 面積カウントの面積差が生じます。

表 30 例 No. 4 に対する積分結果 : 面積

ピーク番号	リテンションタイム A. 10. 02	面積 A. 10. 02	面積 B. 01. 01	相違、絶対値	相違 相対値 /%
ピーク 1	0. 898035347	24. 03518105	24. 046278 00	0. 011096954	0. 046
ピーク 2	1. 289547563	2. 057008743	2. 062850475	0. 005841732	0. 284
ピーク 3	1. 610636592	17. 13418198	17. 13872719	0. 004545212	0. 027

表 31 例 No. 3 ピーク開始に対する積分結果

ピーク番号	リテンションタイム A. 10. 02	ピーク開始 A. 10. 02	ピーク開始 B. 01. 01	相違、絶対値	相違 相対値 /%
ピーク 1	0. 898035347	0. 838035345	0. 838035345 0	0. 000000000	0. 000
ピーク 2	1. 289547563	1. 227166653	1. 227166653	0. 000000000	0. 000
ピーク 3	1. 610636592	1. 510636568	1. 510636568	0. 000000000	0. 000

表 32 例 No. 3 に対する積分結果 : ピーク終了

ピーク番号	リテンションタイム A. 10. 02	ピーク終了 A. 10. 02	ピーク終了 B. 01. 01	相違、絶対値	相違 相対値 /%
ピーク 1	0. 898035347	1. 071937919	1. 072104931 0	0. 000167012	0. 016
ピーク 2	1. 289547563	1. 500499964	1. 500499964	0. 000000000	0. 000
ピーク 3	1. 610636592	1. 92050004	1. 920500040	0. 000000000	0. 000

検証済みシステムへの影響 – 「拡張インテグレータ」に基づく

Chem32 インテグレータの改良された積分アルゴリズムにより、精度がよく再現性の高い結果が得られます。（面積、高さ、ピーク幅など）レポートされた積分結果の中で変化を確認できます。アマウントへの影響は少なく、一般的には分析要求の精度範囲内です。

固有のアプリケーション次第で、一般的に小さく非対称形状のピークに対する積分結果で最大の変化が見られます。これらのピークでは、Chem32 インテグレータでの開始および終了位置決定が改良され、差が最大になります。ピーク全体のデータポイントの数が少ない場合、開始ポイントなどのポイント差が大きく影響し、改良された積分結果に表示されます。

これらの結果に基づき、新しい Chem32 インテグレータが以下の範囲に影響を及ぼす可能性があることに注意してください。

結果：	アマウント、キャリブレーション面積、レスポンスファクタ、など。
ユーザー必要事項仕様：	合格基準、など
機能仕様：	S/N、ピーク対称度、など。

以下の場合、Chem32 インテグレータの改良があなたの作業に影響を及ぼす可能性があります。

- 既存のアップロードされたメソッドで作業を続ける場合、
- 種々の文書で定義された仕様を比較する場合、
- 再解析のために「古い」データをアップロードする必要がある場合、または異なる研究室間などの置換された結果を比較する必要がある場合。

「拡張インテグレータ」に基づく A.xx.xx からの既存のメソッドを用いて作業を続けます。

「拡張インテグレータ」からの積分イベントは、32 ビット構成の ChemStation 用のままです。シグナル固有積分イベントの値は、A.xx.xx ChemStation の「拡張インテグレータ」からの定義された値です。インテ

グレータの改良が影響するため、積分結果が異なる可能性があります。あなたのメソッドのそれぞれに対するリキャリブレーションのニーズを評価するために、リビジョン A.xx.xx で以前にキャリブレーションされたデータを用いて、あなたのメソッドのそれぞれに対するリキャリブレーション例を作成することが必要です。メソッドを部分的に再バリデーションする必要があるかを評価する必要があります。データ取込パラメータは変化のないままのため、既存のデータセットに基づいて再バリデーションできます。

積分値に関連する製品仕様を使用する場合

リビジョン B.0x.0x の改良された積分イベントは、以下の結果に影響を及ぼします。面積、高さ、ピーク幅、ピーク対称、ピーク開始および終了時間ピークなど。アマウントへの影響は少なく、一般的には分析要求の精度範囲内です あなたの製品仕様がこれらの結果の 1 つに基づく場合、それに応じて積分イベントを変更する必要があります。メソッドの一部を再バリデーションする必要があるかを評価する必要があります。データ取込パラメータは変更せず、既存のデータセットに基づいて再バリデーションします。

再解析、データ互換のために ChemStation リビジョン A.xx.xx をアップロード

再解析や異なる ChemStation リビジョン間でのデータ互換、監査目的、または他の理由のために、ChemStation リビジョン A.xx.xx データをアップロードする必要があります。

異なるリビジョンの ChemStation システム間でのデータ互換

リビジョン A.xx.xx を使用している研究室とリビジョン B.0x.0x ChemStation を使用している研究室からの結果を比較するために、実験に使用される条件のすべてを文書化する必要があります。結果の比較または解釈のために、インテグレータ間のバリデーションを考慮できるように、そして適切に文書化できるように、積分タイプおよびイベントを記述しておく必要があります (たとえば、メソッドバリデーションプロセス中の堅牢性試験のため)。

監査目的、検査などのためのリビジョン A.xx.xx ChemStation データの復元

古いリビジョン A.xx.xx データファイルの結果を復元または再現する必要がある規制下の場合、古いデータファイルを再解析する必要がある場合があります。リビジョン B.0x.0x の Chem32 インテグレータにより、異なる積分結果が生じる可能性があります。

しかしながら、インテグレータにより、同等のベースライン構成を生成する積分イベントを指定できるようになります。新しいベースライン構成がオリジナルのベースライン構成と視覚的に一致していれば、結果の違いは分析精度から見えても非常に小さくなります。ベースライン構成が一致せず、積分イベントを使用しても達成できない場合、マニュアルでのベースラインの構成を考慮することが必要です。ChemStation Plus ユーザーにより、ChemStore データベースからのマニュアルベースライン再構成のためのピーク開始および終了時間を検索できます。

注記

この「アップグレードガイド」は規制当局の監査目的のために重要で、監査員が「拡張インテグレータ」設定を持つメソッドを使用して ChemStation リビジョン A.xx.xx で作成されたデータの再解析を要求する場合に、監査のために使用できるようにすることが必要です。

拡張ベースラインを用いたインテグレータからのアップグレード

リビジョン A.xx.xx ChemStation の拡張インテグレータ内に［**拡張ベースライン**］オプションを含むメソッドがリビジョン B.0x.0x システムに読み込まれる場合、システムにはダイアログが表示されます。非更新設定を含むメソッドが読み込まれたことがダイアログに表示され、リビジョン B.0x.0x システムで使用できるようにするために自動的に更新されることが知らされます。続行するには **OK** を選択する必要があります（『154 ページ 図 28』を参照）。メソッドは自動的に更新されます。

図 28　システムダイアログ

注記

メソッドを保存するだけで、新しい積分イベントは保存されるます。オリジナルの 16 ビットメソッドのコピーを保持する場合、新しい名前でメソッドを保存します。

オリジナルのメソッドが保存され、ChemStation リビジョン A.xx.xx と下位互換性があります。リビジョン B.0x.0x システムで 16 ビットメソッドを保存する場合、名前を変更するよう常に促されます。

リビジョン B.0x.0x の ChemStation 32 インテグレータは、リビジョン A.xx.xx で使用されている**「拡張インテグレータ」**の改良版です。Chem32 インテグレータはリビジョン B.0x.0x ChemStation 用の標準インテグレータです。［**拡張ベースライン**］オプション」は、［**ベースライン補正**］と呼ばれるさらに強力な機能に置換されました（『155 ページ 図 29』を参照）。

注記

新しい Chem32 「**ベースライン補正**」パラメータは、「**拡張ベースライン**」オプションよりさらに強力です。これらは異なるイベントで、異なる機能を示します。

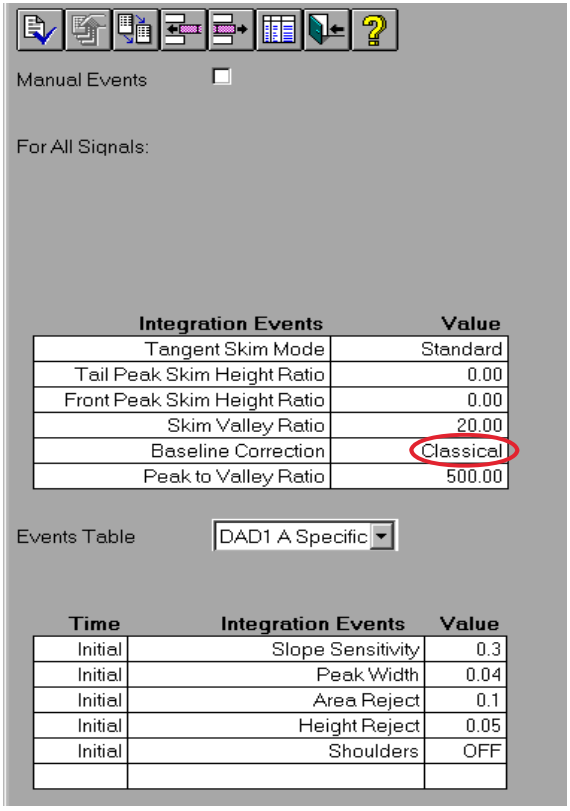


図 29　Chem32 インテグレータスクリーンショット例

システムは以下のモードで動作可能です。

1 **クラシック**モード（デフォルト）、追加ベースライン処理なし

2 オプション［**落ち込みなし**］により、ベースラインの再構成が実行されます。追加のレビューパスにより、システムによりいずれのベースラインの落ち込みも排除されます。ピークの開始および終了は、落ち込みが残らなくなるまで、ピーク頂点の方へシグナルに沿ってシフトされます。

3 オプションの［拡張］により、落ち込み排除と追加の開始/終了ピーク位置決定が組み合わされます。ベースライン構成は再配置されます。

『ChemStation の概要』マニュアルの積分の節で、ベースライン補正用のパラメータセットが詳しく説明されます。

検証済みシステムへの影響 – 「拡張ベースライン」を持つ「拡張インテグレータ」に基づく

［拡張ベースライン］オプションを削除することで、未割り当て面積および再定義ベースライン割り当てを再配置するための追加承認が削除されました。そのため、リビジョン A.xx.xx からの積分結果は、リビジョン B.0x.0x での Chem32 インテグレータによる積分結果との互換性はありません。Chem32 インテグレータに従って、積分設定を調整する必要があります。積分を改善するために、リビジョン B.0x.0x の新しい積分機能の使用を推奨します。新たに実行された積分イベントにより、ベースライン処理の精度を改善できます。

インテグレータの変更が以下の項目に影響を及ぼす可能性があることに注意してください。

結果：	アマウント、キャリブレーション面積、レスポンスファクタ、など。
ユーザー必要事項仕様：	合格基準、など
機能仕様：	S/N、ピーク対称度、など。

以下の場合、これらの変更があなたに影響を及ぼす可能性があります。

- 既存のアップロードされたメソッドで作業を続ける場合
- 種々の文書で定義された仕様を比較する場合
- 再解析のために「古い」データをアップロードする必要がある場合、または異なる研究室間などの置換された結果を比較する必要がある場合。

「拡張ベースラインを持つ拡張インテグレータ」に基づく A. xx. xx からの既存のメソッドを用いて作業を続ける

リビジョン B.0x.0x でメソッドをアップロードして積分設定を編集した後、拡張ベースラインオプションは削除されました。積分パラメータ値は、A.xx.xx ChemStation の「拡張インテグレータ」の積分イベントからの特定の設定に反映されます。新しい追加積分イベントのすべてがデフォルト値に設定されます。Chem32 インテグレータデフォルト値は、『155 ページ 図 29』に示します。それに応じて、積分イベントを再定義する必要があります。Chem32 で使用可能な新しい積分イベントを使用して、積分の改良の利点を生かすことを Agilent はお勧めします。

インテグレータ設定の最適化後、リビジョン B.0x.0x で更新された検量線を得るため、リキャリブレーション / 置換機能で既存のキャリブレーションテーブルを更新する必要があります。更新されたキャリブレーションテーブルには、あなたの更新された積分設定に対応する新しく計算された面積が含まれます。あなたのメソッドのそれぞれに対して、リビジョン A.xx.xx のオリジナルの検量線とリビジョン B.0x.0x の更新された検量線の相違を評価する必要があります。

メソッドまたはシステムを部分的に再バリデーションする必要があるかを評価する必要があります。データ取込パラメータは変更せず、既存のデータセットに基づいて再バリデーションします。

積分値に関連する製品仕様を使用する場合

更新された積分イベントにより、以下の結果に影響が及ぶ可能性があります。面積、高さ、ピーク幅、ピーク対称、ピーク開始および終了時間ピークなど。あなたの製品仕様がこれらの結果のいずれかに基づく場合、それに応じて積分イベントを変更する必要があります。

メソッドまたはシステムを部分的に再バリデーションする必要があるかを評価する必要があります。データ取込パラメータは変更せず、既存のデータセットに基づいて再バリデーションします。

ChemStation リビジョン A.xx.xx データをアップロードする必要があります。

再解析や異なる ChemStation リビジョン間でのデータ互換、監査目的、または他の理由のために、ChemStation リビジョン A.xx.xx データをアップロードする必要があります。

異なるリビジョンの ChemStation システム間でのデータ互換

リビジョン A.xx.xx を使用している研究室とリビジョン B.0x.0x ChemStation を使用している研究室からの結果を比較するために、実験に使用される条件のすべてを文書化する必要があります。結果の比較または解釈のために、インテグレータ間のバリデーションを考慮できるように、そして適切に文書化できるように、積分タイプおよびイベントを文書化する必要があります (たとえば、メソッドバリデーションプロセス中の耐久性試験のため)。

監査目的、検査などのためのリビジョン A.xx.xx ChemStation データの復元

古いリビジョン A.xx.xx データファイルの結果を復元または再現する必要がある規制下の場合、古いデータファイルを再解析する必要がある場合があります。リビジョン B.0x.0x の Chem32 インテグレータにより、異なる積分結果が生じます。しかしながら、インテグレータにより、同等のベースライン構成を生む積分イベントを指定できるようになります。ベースライン構成がオリジナルのベースライン構成と視覚的に一致する場合、相違は分析精度に対して非常に小さくできます。ベースライン構成が一致せず、積分イベントを使用しても達成できない場合、マニュアルでのベースラインの構成を考慮することが必要です。ChemStation Plus ユーザーにより、ChemStore データベースからのマニュアルベースライン再構成のためのピーク開始および終了時間を検索できます。

注記

この「アップグレードガイド」は規制当局の監査目的のために重要で、監査員が**「拡張ベースラインを持つ拡張インテグレータ」**設定を持つメソッドを使用して ChemStation リビジョン A.xx.xx で作成されたデータの再解析を要求する場合に、監査のために使用できるようにすることが必要です。

9 アップグレードが LC メソッドへ与える影響

この章では、クラシックドライバを使ったときと RC.NET ドライバを使ったときの、取り込みパラメータの格納方法の違いを説明します。

技術的な背景

ChemStation B.04.02 は、大部分の 1100/1200 LC 機器モジュール用の新しいドライバセット（RC.NET ドライバ）を備えています（「『73 ページ 図　表 10』」～「『76 ページ 図　表 14』」を参照）。これらのドライバを使うと、新しいユーザーインタフェースが利用可能になります（「『「LC ChemStation の新しいユーザーインタフェース」71 ページ 図』」を参照）。

これらの機器ドライバの新しい構造では、メソッドへの機器パラメータの格納方法を変更する必要があります。ChemStation リビジョン B.04.01 以前でクラシックドライバを使っていたときは、機器パラメータは .reg ファイル（たとえば、ポンプパラメータの場合は、LPMP1.reg）に格納されていました。1100/1200 モジュールで RC.NET ドライバを使う場合は、取り込みパラメータは、.xml タイプのファイルに格納されます。機器パラメータの格納方法がこのように異なるため、既存のメソッドは移行する必要があります。

メソッドの移行

メソッドの移行は、クラシックドライバを使っていたメソッドを RC.NET ドライバを使っている LC ChemStation に読み込んだときに、ChemStation によって自動的に行われます。

.reg ファイル内に格納されていた取り込みパラメータは、現在設定されているモジュールの、対応する .xml ファイルに書き込まれます。.reg ファイルは削除されませんが、.reg.bak というファイルに改名されます。

注記

RC.NET ドライバを使用中に作成したメソッドは、移行対象ではありません。それらのメソッドは、クラシックドライバで制御される機器では使用できません。また、移行したメソッドは、クラシックドライバでは読み込めません。

9 アップグレードが LC メソッドへ与える影響

メソッドの移行

10 ChemStation リビジョン B.04.0x を使ったときのスペクトル / 純度オプション（リビジョン A.xx.xx のアップグレード関連のみ）

スペクトル / 純度ツールセットの概要 164
「新しい」スペクトル / 純度ツールセットへのアップグレード 167
UV ライブラリおよびそれらの結果 175

この章では、ChemStation リビジョン A にある 2 つの使用可能なスペクトル / 純度のツールセットの違いの概要を説明します。ChemStation リビジョン B.0x.0x では、リビジョン A.04.02 で導入されたスペクトルツールが標準ツールセットになりました。以前のスペクトルツールは使用できなくなりました。

スペクトル / 純度ツールセットの概要

注記

この章は、ChemStation リビジョン A.xx.xx で使用可能な「古い」スペクトル / 純度ツールセットを使用してアップグレードしたメソッドに対してのみ適用されます。「新しい」スペクトル / 純度ツールセットを使用したリビジョン A.04.02 以降のすべての ChemStation メソッドでは、これが継続的に使用されます。ChemStation リビジョン A.xx.xx の「新しい」スペクトル / 純度ツールは、ChemStation リビジョン B でのの標準ツールセットです。

リビジョン A.04.02 以降、A.10.02 以前の Agilent ChemStation では、2 つの異なるスペクトル / ピーク純度オプションの使用が可能でした。

- 「古い」スペクトル / 純度設定（リビジョン A.04.01 以降）

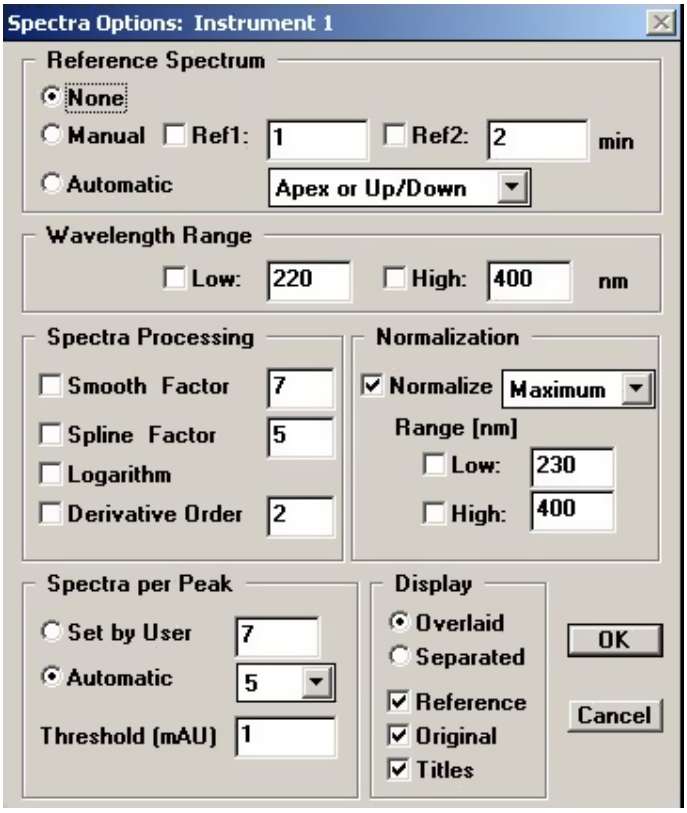


図 30　「古い」スペクトル / 純度設定（リビジョン A.04.01 以降）

- 「新しい」スペクトル / 純度設定（リビジョン A.04.02 以降）

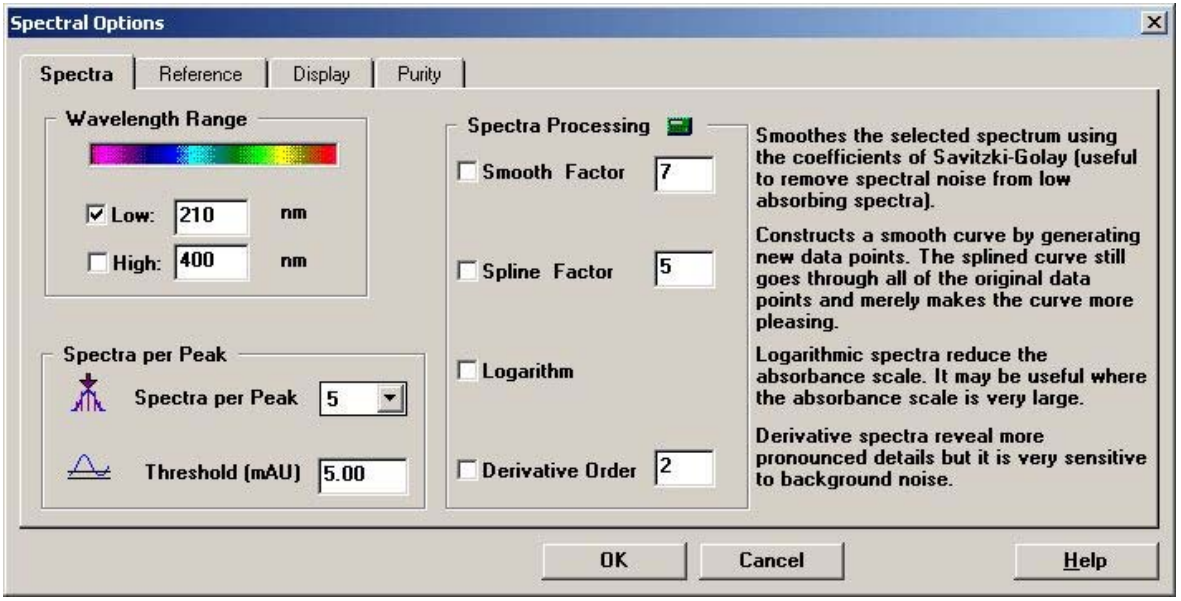


図 31　「新しい」スペクトル / 純度設定（リビジョン A.04.02 以降）

ChemStation リビジョン A.04.02 上で新しいメソッド作成時には、2 つのスペクトル / 純度ツールが含まれます。初めてのスペクトル / ピーク純度設定に入る時にどちらかのツールセットを使用するかを決定する画面が表示されます。一旦スペクトル / 純度設定が選択されると、それらはメソッドに保存されます。

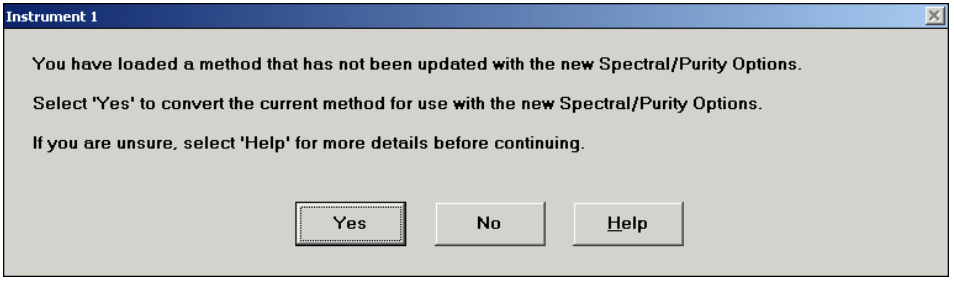


図 32　リビジョン A.04.02 以降。スペクトル / ピーク純度設定の選択

「新しい」スペクトル / 純度設定が標準の ChemStation である ChemStation リビジョン B を導入すると、「古い」スペクトル / 純度ツールセットはもう使用できません。

「新しい」スペクトル / 純度ツールセットへのアップグレード

「古い」スペクトル / 純度ツールセットを含むリビジョン A.xx.xx のメソッドを ChemStation リビジョン B に読み込む場合、「新しい」スペクトル / 純度ツールセットへの変更について警告されます。

図 33　「古い」スペクトル / 純度ツールセットを含むメソッドのアップグレード警告

A.xx.xx で定義されたスペクトル / 純度値は、「新しい」スペクトルツールセットに転移され、変更を目に見えるようにするために**「メソッド変更フラグ」**がメソッドに与えられます。オリジナル名を使用してメソッドが保存され場合、もう下位互換性がなくなり、「新しい」スペクトル / ツールセットが含まれます。メソッドを上書きしないために、更新されたメソッドを新しい名前で保存します。

「古い」および「新しい」スペクトル / 純度パラメータは、以下のようにわずかに異なる動作をします。「新しい」スペクトル / 純度ツールセットはさらに自動化されます。そのため、両方のツールセットの結果は直接の互換性はなく、専門家の比較を必要とします。

両方のスペクトル / 純度ツールセットを比較できるようにするために、以下の表に使用されるパラメータおよびそれらの相違の概観を表示することが必要です。表は次のセクションに分割されます： スペクトルおよび純度。「古い」ツールセットでは、これはデータ解析項目［**スペクトル**］内の 2 つの異なるメニュー項目でしたが、一方「新しい」ツールセットでは両方の項目がデータ解析メニュー［**スペクトル**］内の［**スペクトルオプション**］メニュー項目の 2 つのタブとして扱われます。

表 33　スペクトルツールセットの新旧比較

パラメータ	「古い」スペクトルセット A.04.01 から B.0x.0x まで	「新しい」スペクトルセット A.04.02 から B.0x.0x まで	コメント
リファレンススペクトル	表示および計算に使用されるリファレンススペクトルを決定するためのパラメータ スペクトルおよび純度の表示 / 計算の両方に対して個々のパラメータを定義 • なし • マニュアル • 自動（頂点、アップ / ダウン 最も近いベースライン、ピークベースライン）	表示および計算に使用されるリファレンススペクトルを決定するためのパラメータ スペクトルおよび純度の表示 / 計算の両方に対して同じパラメータを使用 • なし • マニュアル • 自動（データ取込パラメータに応じて、リファレンスを決定。ヘルプを参照） **注**：「古い」自動モード、ピークベースラインに対応する自動モード：ピークベースライン	使い勝手および比較を改善するために、現在リファレンススペクトルに対する固有の値はスペクトルおよび純度で同じ設定です。スペクトルおよび純度設定で異なる値が選択された時、これによる情報の誤解を回避します。 リファレンススペクトルの自動モードを改善。選択されたリファレンススペクトルは、スペクトルモード、スペクトルタイプおよび使用可能なベースラインスペクトルによって異なります。 **注**：比較目的のために標準値が使用され、自動化モードのユーザー選択は削除されます。 **UV ライブラリに対する影響**：使用されるリファレンスに応じて、異なるスペクトルが UV ライブラリ内に保存されます。スペクトル / 純度オプションをアップグレードする場合、スペクトルライブラリをアップグレードすることを推奨します。
波長範囲	シグナル表示用の波長範囲を定義するためのパラメータ。 スペクトルまたは純度の表示の両方に対して個々パラメータを定義	シグナル表示用の波長範囲を定義するためのパラメータ。 スペクトルおよび純度の表示の両方に対して同じパラメータを使用	

表 33　スペクトルツールセットの新旧比較

パラメータ	「古い」スペクトルセット A.04.01 から B.0x.0x まで	「新しい」スペクトルセット A.04.02 から B.0x.0x まで	コメント
スペクトル処理	表示するスペクトル処理方法の設定 • スムースファクタ • スプラインファクタ • LOG • 微分次数 スペクトルまたは純度の表示の両方に対して個々パラメータを定義	表示するスペクトル処理方法の設定 • スムースファクタ • スプラインファクタ • LOG • 微分次数 スペクトルおよび純度の表示の両方に対して同じパラメータを使用	
ピークあたりのスペクトル	パラメータにより、いくつのスペクトルを抽出するかを指定 スペクトルまたは純度の表示の両方に対して個々パラメータを定義 • ユーザー定義されたピークあたりのスペクトル • 自動定義されたピークあたりのスペクトル • スレッショルド	パラメータにより、いくつのスペクトルを抽出するかを指定 パラメータは、スペクトル表示でのスペクトル抽出のためだけに使用されます。 • 自動定義されたピークあたりのスペクトル • スレッショルド	ユーザー定義のピーク当たりのスペクトルセットは、ピーク全体のおおよそ等間隔に定義された x 個のスペクトルを要します。[**自動**] を使用して、たとえば値には 5 を選択する場合は、ChemStation によって、ピーク幅と対称度に従ってピーク全体で 5 つのスペクトルが抽出されます。 **注**： 比較目的のために標準値を使用、ユーザー定義オプションが削除されます。

表 33　スペクトルツールセットの新旧比較

パラメータ	「古い」スペクトルセット A.04.01 から B.0x.0x まで	「新しい」スペクトルセット A.04.02 から B.0x.0x まで	コメント
標準化	スペクトルおよび純度ウィンドウの両方に対して、[標準化] モード用表示オプションを個々に定義	スペクトルおよび純度計算の両方に対して、同じ表示オプションを使用	
表示	スペクトルウィンドウの表示設定を定義するためのパラメータ	スペクトルウィンドウの表示設定を定義するためのパラメータ	

表 34　純度ツールセットの新旧比較

パラメータ	「古い」純度セット A.04.01 から B.0x.0x まで	「新しい」純度セット A.04.02 から B.0x.0x まで	コメント
リファレンススペクトル	表示および計算に使用されるリファレンススペクトルを決定するためのパラメータ 純度計算のためにリファレンスを定義する必要があります。つまり、オプション［なし］を使用する場合、ポップアップメッセージによりリファレンスの指定を余儀なくされます。 • なし • マニュアル • 自動（頂点、アップ / ダウン、最も近いベースライン、ピークベースライン）	表示および計算に使用されるリファレンススペクトルを決定するためのパラメータ スペクトルおよび純度の表示 / 計算の両方に対して使用される同じパラメータ。純度計算のために［オプション］を使用できます。 • なし • マニュアル • 自動（データ取込パラメータに応じて、リファレンスを決定。ヘルプを参照） **注**：「古い」自動モード、ピークベースラインに対応する自動モード：ピークベースライン	使い勝手および比較を改善するために、現在リファレンススペクトルに対する固有の値はスペクトルおよび純度で同じ設定です。スペクトルおよび純度設定で異なる値が選択された時、これによる情報の誤解を回避します。 リファレンススペクトルの自動モードが改良され、選択されたリファレンス / スペクトルはスペクトルモード、スペクトルタイプ、およびベースラインスペクトルの使用の可能性によって異なります。 **注**：比較目的のために標準値が使用され、自動化モードのユーザー選択は削除されます。 **UV ライブラリに対する影響**：使用されるリファレンスに応じて、異なるスペクトルが UV ライブラリ内に保存されます。スペクトル / 純度オプションをアップグレードする場合、スペクトルライブラリをアップグレードすることを推奨します。

表 34　純度ツールセットの新旧比較

パラメータ	「古い」純度セット A.04.01 から B.0x.0x まで	「新しい」純度セット A.04.02 から B.0x.0x まで	コメント
ピークあたりのスペクトル	パラメータにより、いくつのスペクトルを用いて比較のための平均スペクトルを計算するかを指定 • ユーザー定義されたピークあたりのスペクトル • 自動定義されたピークあたりのスペクトル • スレッショルド	純度を評価するために、ピークあたり 5 つのスペクトルが使用されます。アップスロープおよびダウンスロープそれぞれに 2 つのスペクトルと、最上部に 1 つ（最上部または頂点スペクトル）。5 つのスペクトルは平均され、スペクトルに記録されたすべてのスペクトルと比較されます。	ユーザー定義のピーク当たりのスペクトルセットは、ピーク全体のおおよそ等間隔に定義された x 個のスペクトルを要します。[自動] を使用して、たとえば値には 5 を選択する場合は、ChemStation によって、ピーク幅と対称度に従ってピーク全体で 5 つのスペクトルが抽出されます。 **注**： 比較目的のために標準値が使用され、ユーザー定義オプションが削除されます。 一致結果に対する影響： 一致結果は使用される比較用平均スペクトルによって異なります。
ピークあたりのスペクトル	表示オプションを定義するためのパラメータ	すべての純度関連グラフィックオプションは純度ウィンドウに表示されます	

表 34　純度ツールセットの新旧比較

パラメータ	「古い」純度セット A.04.01 から B.0x.0x まで	「新しい」純度セット A.04.02 から B.0x.0x まで	コメント
純度レベル計算	ピークの純度レベルの計算またはシミラリティカーブとスレッショルドカーブの構成に使用したスペクトルを指定します。 デフォルト値は平均スペクトル。スペクトルのノイズの影響は削減されます。	ピークの純度レベルの計算またはシミラリティカーブとスレッショルドカーブの構成に使用したスペクトルを指定します。 デフォルト値は平均スペクトル。スペクトルのノイズの影響は削減されます。	正確には同じパラメータですが、平均スペクトルが計算に使用される場合、計算は異なります。 純度ファクタへの影響： 純度ファクタ結果は、使用される比較用平均スペクトルによって異なる可能性があります。
ノイズ計算	バックグラウンドノイズからスレッショルドカーブを計算する方法を定義します	バックグラウンドノイズからスレッショルドカーブを計算する方法を定義します	スペクトル / 純度セットの両方に対して、ノイズ計算は同じです

UV ライブラリおよびそれらの結果

UV ライブラリは選択されたスペクトルにより構築されます。選択されたスペクトル / 純度ツールセットで定義された設定を使用してスペクトルは保存されています。これらのパラメータに応じて、ライブラリは純粋なスペクトルまたはリファレンスにより補正されたスペクトルのどちらかに基づいて作成されます。未知サンプルのスペクトルに対するライブラリスペクトルの比較にはまだ熟練した解釈が必要です。これは、考慮する必要がある多くの影響があるためです。

ChemStation リビジョン B.0x.0x では、リビジョン A.xx.xx ChemStation の「新しい」スペクトル / 純度ツールセットが現在は標準ツールセットです。このツールセットはさらに自動化および拡張され、スペクトルの比較がさらに容易になります。

「古い」スペクトル / 純度ツールセットに構築された UV ライブラリには、「リファレンススペクトル」に使用されるモードを指定し、純度計算に使用される「ピークあたりのスペクトル」を定義するオプションが含まれました。両方のオプションが「新しい」スペクトル / 純度ツールセットを使用して自動化され、これらは今では自動的に計算される設定または固定される値のどちらかを使用します（たとえば、純度計算のため現在は「ピークあたりのスペクトル」が 5 つのスペクトルに固定されています）。

これらの変更のため、同じメソッド、データファイル、および UV ライブラリを使用している場合でさえ、マッチファクタおよび純度結果は A.xx.xx ChemStation と B.0x.0x ChemStation の間で異なる可能性があります。異なるスペクトル / 純度ツールセットを使用したシステムからの結果を比較するために、変化を考慮して適切に文書化できるように、使用されるスペクトル / 純度設定の詳細を記述しておく必要があります。

注記

この「アップグレード準備ガイド」は規制当局の監査目的のために重要で、監査員が「古い」スペクトル / 純度ツールセットを持つメソッドを使用して ChemStation リビジョン A.xx.xx で作成されたデータの再解析を要求する場合に、監査のために使用できるようにすることが必要です。

「新しい」スペクトル / 純度ツールを使用して対象のスペクトルエントリを作成することが必要になる可能性があります。リビジョン B.0x.0x でメソッドをアップグレードした後、「古い」スペクトル / 純度ツールを使用し

て作成されたエントリまたはライブラリ全体を再加工する必要があるかを確かめるために、UV ライブラリエントリを確認することが必要です。最善の選択肢は、リビジョン B.0x.0.x で標準のスペクトル / 純度ツールセットを使用することで設定される新しい UV ライブラリを構築することです。

11 付録

ChemStation レポート 178
概要 178

付録では、異なるバージョンで生成されたクロマトグラム例が提供されます。

ChemStation レポート

概要

この付録では、ChemStation A.10.02 から ChemStation Rev. B.01.01 への実際のアップグレードを示すため、各種の ChemStation レポートを提示しています。この付録内のすべての ChemStation レポートは、「『「拡張インテグレータからのアップグレード」137 ページ 図』」で使われた、サンプルクロマトグラム No. 1 と No. 2 に対応しています。

サンプルクロマトグラム No. 1

1 リビジョン A.10.02:

積分結果を取得するために、サンプルファイルが処理され、Area% レポートが生成されました（「『179 ページ 図 34』」を参照）。

2 リビジョン B.01.01:

同じサンプルファイルを再解析するために、リビジョン B.01.01 ChemStation にアップロードされたメソッドが使われます。Area% レポートが作成されました（「『180 ページ 図 35』」を参照）。

サンプルクロマトグラム No. 2

1 リビジョン A.10.02

3 つのレベルのキャリブレーションテーブルが作成されました。結果を取得するために、サンプルファイルが処理され、ESTD レポートが生成されました（「『181 ページ 図 36』」を参照）。

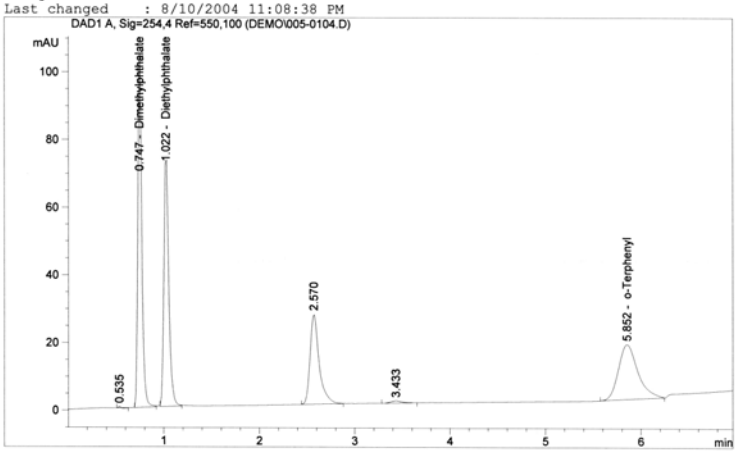
2 リビジョン B.01.01

リビジョン B.01.01 ChemStation にアップロードされたメソッドは、各キャリブレーションレベルに対して、**置換**オプションを使用して、再キャリブレーションされました。同じサンプルファイルが使われて結果が再解析され、ESTD レポートが生成されました（「『182 ページ 図 37』」を参照）。

サンプルクロマトグラム 1 A.10.02

Data File C:\HPCHEM\1\DATA\DEMO\005-0104.D Sample Name: Isocratic Std. 1

```
Injection Date  : 4/19/94 8:08:45 AM          Seq. Line :   1
Sample Name     : Isocratic Std. 1            Location : Vial 5
Acq. Operator   : a.g.h.                         Inj :   4
Acq. Instrument : HP LC 1050                 Inj Volume : 2 µl
Acq. Method     : DEMO.M
Analysis Method : C:\HPCHEM\1\METHODS\DEMO1.M
Last changed    : 8/10/2004 11:08:38 PM
```



Area Percent Report

```
Sorted By             :      Signal
Calib. Data Modified  :      Tuesday, August 10, 2004 11:08:36 PM
Multiplier            :      1.0000
Dilution              :      1.0000
Use Multiplier & Dilution Factor with ISTDs

Signal 1: DAD1 A, Sig=254,4 Ref=550,100
```

Peak #	RetTime [min]	Type	Width [min]	Area [mAU*s]	Area %	Name
1	0.535	PP	0.0214	2.85332e-1	0.0295	?
2	0.747	BB	0.0449	294.85150	30.4888	Dimethylphthalate
3	1.022	BB	0.0524	261.40094	27.0299	Diethylphthalate
4	2.570	BB	0.1011	175.77811	18.1762	?
5	3.433	PP	0.1228	5.45116	0.5637	?
6	5.852	PP	0.2125	229.31325	23.7119	o-Terphenyl

```
Totals :                      967.08028

 Results obtained with enhanced integrator!
```

*** End of Report ***

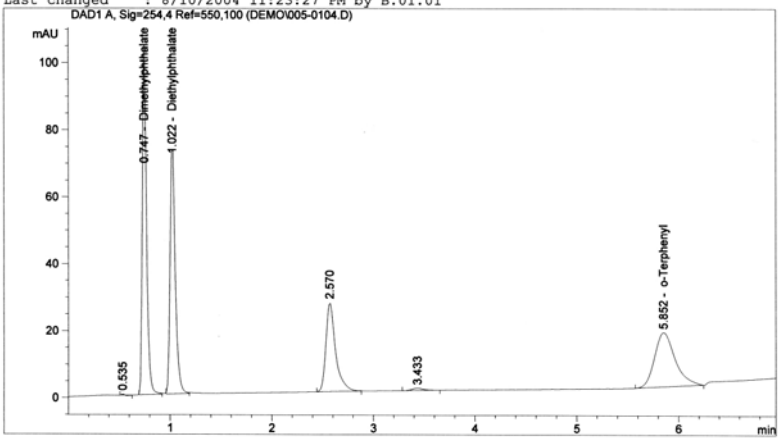
Instrument 1 8/10/2004 11:09:00 PM Page 1 of 1

図 34 サンプル 005-0104.d についての Area% レポート - ChemStation A.10.02 で作成

サンプルクロマトグラム 1 B.01.01:

Data File C:\CHEM32\1\DATA\DEMO\005-0104.D
Sample Name: Isocratic Std. 1

```
Injection Date  : 4/19/94 8:08:45 AM            Seq. Line :   1
Sample Name     : Isocratic Std. 1               Location : Vial 5
Acq. Operator   : a.g.h.                           Inj :   4
Acq. Instrument : HP LC 1050                   Inj Volume : 2 µl
Acq. Method     : DEMO.M
Analysis Method : C:\CHEM32\1\METHODS\DEMO1_32A.M
Last changed    : 8/10/2004 11:23:27 PM by B.01.01
```



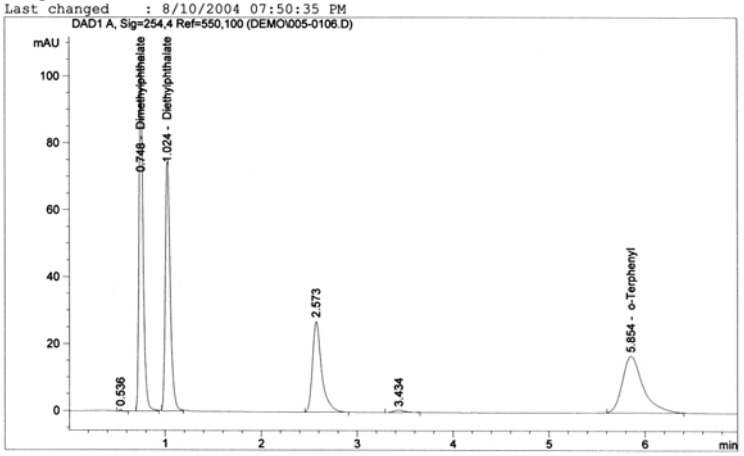

```
                        Area Percent Report

Sorted By             :      Signal
Calib. Data Modified  :      Tuesday, August 10, 2004 11:23:24 PM
Multiplier            :      1.0000
Dilution              :      1.0000
Use Multiplier & Dilution Factor with ISTDs


Signal 1: DAD1 A, Sig=254,4 Ref=550,100

Peak RetTime  Type    Width     Area      Area     Name
  #   [min]           [min]    [mAU*s]     %
----|-------|------|-------|----------|--------|--------------------
   1   0.535 BB      0.0214 2.85319e-1   0.0295 ?
   2   0.747 BB      0.0449  294.85150  30.4851 Dimethylphthalate
   3   1.022 BB      0.0524  261.41324  27.0279 Diethylphthalate
   4   2.570 BB      0.1011  175.88335  18.1848 ?
   5   3.433 BB      0.1228    5.45111   0.5636 ?
   6   5.852 BV      0.2125  229.31276  23.7090 o-Terphenyl

Totals :                    967.19728


                      *** End of Report ***

Instrument 1 8/10/2004 11:26:27 PM B.01.01                    Page   1 of 1
```

図 35　サンプル 005-0104.d についての Area% レポート - ChemStation B. 01.01 で生成

サンプルクロマトグラム 2 A.10.02

Data File C:\HPCHEM\1\DATA\DEMO\005-0106.D Sample Name: Isocratic Std. 1

```
Injection Date  : 4/19/94 8:25:02 AM          Seq. Line :   1
Sample Name     : Isocratic Std. 1             Location : Vial 5
Acq. Operator   : a.g.h.                          Inj :   6
Acq. Instrument : HP LC 1050                Inj Volume : 2 µl
Acq. Method     : DEMO.M
Analysis Method : C:\HPCHEM\1\METHODS\DEMO1.M
Last changed    : 8/10/2004 07:50:35 PM
```



External Standard Report

```
Sorted By             :      Signal
Calib. Data Modified  :      Tuesday, August 10, 2004 07:50:31 PM
Multiplier            :      1.0000
Dilution              :      1.0000
Use Multiplier & Dilution Factor with ISTDs

Signal 1: DAD1 A, Sig=254,4 Ref=550,100

RetTime  Type     Area      Amt/Area    Amount   Grp   Name
 [min]          [mAU*s]                 [mg/l]
-------|------|---------|---------|---------|--|------------------
  0.748 BB      300.72705 1.06927e-2    3.21558    Dimethylphthalate
  1.024 BB      266.68295 1.19893e-2    3.19733    Diethylphthalate
  5.854 BB      256.10138 1.24299e-2    3.18331    o-Terphenyl

Totals :                                9.59623

 Results obtained with enhanced integrator!
```

*** End of Report ***

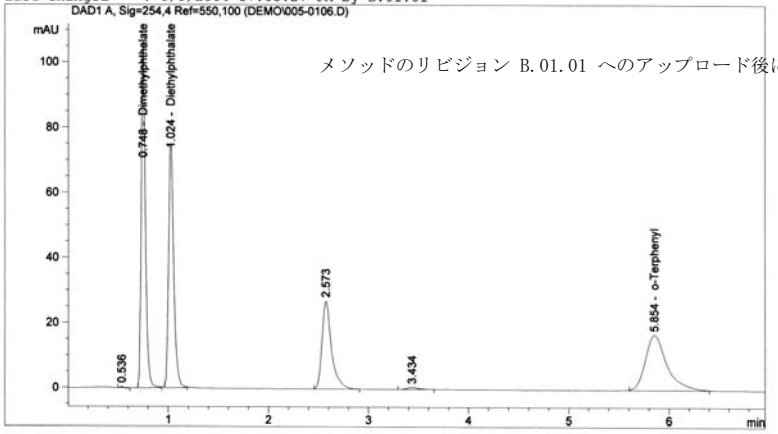
Instrument 1 8/10/2004 11:08:17 PM Page 1 of 1

図 36 サンプル 005-0106.d についての ESTD レポート - ChemStation A.10.02 で生成

サンプルクロマトグラム 2 B.01.01

Data File C:\CHEM32\1\DATA\DEMO\005-0106.D
Sample Name: Isocratic Std. 1

Injection Date	: 4/19/94 8:25:02 AM	Seq. Line	: 1
Sample Name	: Isocratic Std. 1	Location	: Vial 5
Acq. Operator	: a.g.h.	Inj	: 6
Acq. Instrument	: HP LC 1050	Inj Volume	: 2 µl
Acq. Method	: DEMO.M		
Analysis Method	: C:\CHEM32\1\METHODS\DEMO1_32_RECAL.M		
Last changed	: 8/9/2004 17:05:27 PM by B.01.01		



メソッドのリビジョン B.01.01 へのアップロード後にリキャリブレ

External Standard Report

Sorted By : Signal
Calib. Data Modified : Monday, August 09, 2004 17:05:24 PM
Multiplier : 1.0000
Dilution : 1.0000
Use Multiplier & Dilution Factor with ISTDs

Signal 1: DAD1 A, Sig=254,4 Ref=550,100

RetTime [min]	Type	Area [mAU*s]	Amt/Area	Amount [mg/l]	Grp	Name
0.748	BB	300.72705	1.06929e-2	3.21565		Dimethylphthalate
1.024	BB	266.68295	1.19917e-2	3.19797		Diethylphthalate
5.854	BB	256.10138	1.24325e-2	3.18398		o-Terphenyl
Totals :				9.59761		

*** End of Report ***

Instrument 1 8/10/2004 11:26:52 PM B.01.01 Page 1 of 1

図 37 サンプル 005-0106.d についての ESTD レポート - ChemStation B.01.01 で生成

索引

3

35900E A/D
　ファームウェア要件　33
35900E　49

A

Analyst　61
ANSI えいえぬえすあい　120
APM　23

C

CE ファームウェアリビジョン　35
Chem32 インテグレータけむさんじゅうにいんてぐれーた　127
ChemAccess　58
ChemStation レポートけむすてーしょんれぽーと　178
ChemStore　54, 57, 62
CTC サンプラしーてぃーしーさんぷら　60

D

DQ でぃーきゅー　110

G

G1979A マルチシグナル アウトプット アクセサリ　61
GC コンパニオン　54, 59
GC 固有のアップグレード　48
GPC　58
GPIB インタフェース　19

I

IQ　111
IQ あいきゅー　110

L

LAN 接続　36
LC メソッド
　移行　161
LC 固有のアップグレードえるしーこゆうのあっぷぐれーど　48
LC/MS 固有のアップグレードえるしーえむえすこゆうのあっぷぐれーど　49, 49
LC/MSD ファームウェアえるしーえむえすでぃーふぁーむうぇあ　49

O

OQ/PV おーきゅーぴーぶい　110

P

PC、テスト済み　21
PC、要件　19
PQ ぴーきゅー　110
Purify　58

R

RAM らむ　20

T

TCP/IP　36

U

ucl　119
unicode
　から ANSI　120
unicode ゆにこーど　118
user.mac ゆーざーまくろ　119
UV ライブラリゆーぶいらいぶらり　175

V

VGA ディスプレイ ゔぃじーえーでぃすぷれい　19

ア

アーカイブ分割　60
アップグレード手順
　一般的な　41
アドオンソリューション　50
　サポート　51
アドバンストパワーマネージメント　23

イ

イージーアクセス　59

イージーシーケンス 67
インスタレーションの検証 111
インストール
　ハードウェア 19
インテグレータ
　Chem32 127
　拡張 137
　標準 132

カ

カスタマイズされたマクロかすたまいずされたまくろ 119

コ

コンパニオン 63
コンピュータ、最小要求事項こんぴゅーた、さいしょうようきゅうじこう 19
コンプライアンス 110

シ

シーケンス
　セットアップ 67
システム検証しすてむけんしょう 127

ス

スタートアップの変更 67
スタンドアローンヘッドスペースソフトウェア 59
スペクトル / 純度 164
スペクトル / 純度ツールセット
　へのアップグレード 167

セ

セキュリティパック 54, 57, 62

チ

チェックサム 111
チューニングファイルちゅーにんぐふぁいる 49

ツ

ツールバー
　カスタマイズ 114

デ

データブラウザ 59
データ構造
　マクロ 114

ナ

ナビゲーション 85

ハ

ハードウェア
　インストール 19
ハードディスク はーどでぃすく 19

バ

バリデーションばりでーしょん 110

フ

ファイル名
　長さ 100

プ

プリンタ、対応済み ぷりんた、たいおうずみ 21
プレフィックス / カウンタ 104
プロセッサ ぷろせっさ 19

ヘ

ヘッドスペース 63
ヘッドスペースソフトウェア 59

ベ

ベリフィケーション 127

マ

マクロまくろ 114, 119

メ

メソッドバリデーションパック 54
メソッドバリデーションパックめそっどばりでーしょんぱっく 58
メニューバー
　カスタマイズ 114

ユ

ユーザー寄稿ライブラリゆーざーきこうらいぶらり 119

ラ

ライセンスらいせんす 41
ライブラリ

ユーザー寄稿 119

リ

リテンションタイムロッキング 54, 59, 62
リファレンスファイル 111

レ

レポートれぽーと 178

一

一般的なアップグレード手順いっぱんてきなあっぷぐれーどてじゅん 41

稼

稼働性能適格性確認かどうせいのうてきかくせいかくにん 110

拡

拡張インテグレータ
からのアップグレード 137

機

機器コンフィグレーション 48
機器の設定 48

検

検証 111

互

互換性
UV ライブラリ 108
シーケンス 106
データファイル 105
ハイパーシーケンス 107
バッチファイル 107
メソッド 106
レポートファイル 108

最

最低限の要件
RAM 20
ハードディスク 19
プロセッサ 19

自

自動アップグレードじどうあっぷぐれーど 42

新

新機能
B.04.02 67

据

据付時適格性確認すえつけじてきかくせいかくにん 110
据付時適格性評価 111

性

性能適格性確認せいのうてきかくせいかくにん 110

静

静電気放電（ESD） 37

設

設計適格性確認せっけいじてきかくせいかくにん 110

適

適格性 110

内

内蔵ヘッドスペースソフトウェア 55, 55
内蔵ヘッドスペースソフトウェアないぞうへっどすぺーすそふとうぇあ 60

標

標準インテグレータ
からのアップグレード 132

要

要件
PC 19
VGA ディスプレイ 19

www.agilent.com

本書の内容

Agilent ChemStation をリビジョン A/B.xx.xx からリビジョン B.04.02 にアップグレードする場合に、このハンドブックを使用してください。

このハンドブックでは、Agilent ChemStation のリビジョンを実行するのに必要なステップについて説明しています。以前の ChemStation リビジョンと比較しての変更点の詳細や、更新 ChemStation ファイル（メソッド、シーケンスなど）の操作方法が記載されています。

このハンドブックでは、Agilent ChemStation を正常にアップグレードして動作させるために必要な、PC のハードウェアおよびソフトウェアの要件を記載しています。

© Agilent Technologies 1994-2009, 2010

Printed in Germany
4/2010

G2170-96234

Agilent Technologies